

**Titre:** Développement d'une méthode des caractéristiques  
tridimensionnelle et application aux calculs de supercellules d'un réacteur CANDU

**Auteur:** Guang Jun Wu

**Date:** 2001

**Type:** Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

**Référence:** Wu, G. J. (2001). Développement d'une méthode des caractéristiques tridimensionnelle et application aux calculs de supercellules d'un réacteur CANDU  
Citation: [Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie.  
<https://publications.polymtl.ca/8638/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**  
Open Access document in PolyPublie

**URL de PolyPublie:** <https://publications.polymtl.ca/8638/>  
PolyPublie URL:

**Directeurs de recherche:**  
Advisors:

**Programme:** Non spécifié  
Program:

## **NOTE TO USERS**

**This reproduction is the best copy available.**

UMI



UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

DÉVELOPPEMENT D'UNE MÉTHODE DES CARACTÉRISTIQUES  
TRIDIMENSIONNELLE ET APPLICATION AUX CALCULS DE  
SUPERCELLULES D'UN RÉACTEUR CANDU

GUANG JUN WU  
DÉPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE  
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION  
DU DIPLOME DE PHILOSOPHIE DOCTOR  
(GÉNIE NUCLÉAIRE)  
JUN 2001

© Guang Jun Wu. 2001.





**National Library  
of Canada**

**Acquisitions and  
Bibliographic Services**

**395 Wellington Street  
Ottawa ON K1A 0N4  
Canada**

**Bibliothèque nationale  
du Canada**

**Acquisitions et  
services bibliographiques**

**395, rue Wellington  
Ottawa ON K1A 0N4  
Canada**

*Your file Votre référence*

*Our file Notre référence*

**The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.**

**The author retains ownership of the copyright in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.**

**L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.**

**L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.**

**0-612-65552-0**

**Canada**

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Cette thèse intitulée:

DÉVELOPPEMENT D'UNE MÉTHODE DES CARACTÉRISTIQUES  
TRIDIMENSIONNELLE ET APPLICATION AUX CALCULS DE  
SUPERCELLULES D'UN RÉACTEUR CANDU

présentée par: WU Guang Jun

en vue de l'obtention du diplôme de: Philosophiæ Doctor

a été dûment acceptée par le jury d'examen constitué de:

M. PIERRE Samuel, Ph.D., président

M. ROY Robert, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. ROZON Daniel, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

M. KOCLAS Jean, Ph.D., membre

M. HAGHIGHAT Alireza, Ph.D., membre

À mon épouse Lihong

À mon fils Xiaozheng

À mes amis Nicole De Grandmont et Gilles Fortier

## RÉSUMÉ

L'objectif de cette thèse a été de construire une nouvelle méthode de calcul pour déterminer les incréments de sections efficaces associés aux mécanismes de réactivité dans les réacteurs de type CANDU. Un module, nommé MCI, a été développé pour être intégré dans le code DRAGON. Basé sur la méthode des caractéristiques, le module MCI utilise des lignes d'intégration non cycliques pour des calculs de transport tridimensionnels. La méthode des caractéristiques permet de résoudre le même problème que la méthode des probabilités de collision en utilisant considérablement moins d'espace mémoire. Les résultats obtenus par le module MCI sont cohérents avec ceux obtenus par le module EXCELL dans un schéma de calcul pour un réacteur CANDU-6.

L'équivalence de la méthode des caractéristiques avec la méthode des probabilités de collision a été démontrée pour le domaine fini. Basée sur l'équivalence des deux méthodes, une nouvelle méthode d'accélération, nommée SCR (*Self-Collision Rebalancing*), a été développée. L'effet d'accélération s'accumule quand la méthode SCR est utilisée avec d'autres méthodes d'accélération comme la méthode d'accélération variationnelle à un paramètre.

La technique de fusionnement des lignes, TMT (pour *Tracks Merging Technique*), a été développée par le chercheur pour réduire le nombre total des lignes d'intégration nécessaires pour couvrir la géométrie du problème étudié. Le TMT peut être utilisé à deux niveaux: TMT-1 et TMT-2. Un facteur quatre de réduction sur le nombre de lignes a été observé lors l'utilisation du TMT au premier niveau, alors qu'un facteur quarante a été observé lors de son utilisation au deuxième niveau. Le TMT pourra être utilisé sans difficulté par la méthode des probabilités de collision.

Le module MCI est parallélisé dans l'environnement PVM (*Parallel Virtual Machine*). Quatre options de calcul parallèle sont disponibles: SPLT, ANGL, STRD et MCRB. Chacune des quatre correspond à une stratégie de répartition de charge entre les processeurs actifs. Dans les trois premières options, la charge est mesurée en nombre de lignes tandis que, dans la quatrième, la charge est distribuée selon le concept de macrobandes.

## ABSTRACT

The primary purpose of this study was to construct a new method for determining the cross section increments associated with the reactivity mechanisms in CANDU reactors. Based on the characteristics method, the module MCI is successfully developed and is ready to be integrated in the lattice code DRAGON. The module MCI utilizes non cyclic tracks in a three dimensional transport calculation. The characteristics method allows to resolve the same problems as the collision probabilities method but its main advantage relies on a substantial memory economy. The results of MCI module are similar to those of an EXCELL module in the CANDU-6 calculation scheme.

The characteristics method is shown to be equivalent to the collision probability method for the finite domain. A new acceleration technique, the SCR (Self-Collision Rebalancing) technique, was developed using the equivalence of these two methods. When SCR is used with the one parameter variational acceleration method, the resolution converge faster than either of the two.

The Tracks Merging Technique (TMT) is a new technique developed within this research to reduce the total number of tracks needed to cover the geometry of the problem studied. The TMT can be used on two levels: TMT-1 and TMT-2. We have observed a factor of four on the reduction of tracks when the TMT was used on the first level and a factor of forty when used on the second level. The TMT could be used without difficulty in the collision probability method.

The MCI module was parallelized using the PVM (Parallel Virtual Machine) library for distributed-memory environment. One of four options can be used in the parallel calculation: SPLT, ANGL, STRD and MCRB. Each of the four options is associated with a special load balancing strategy. In the first three options, the

load is measured in number of tracks, in the fourth option, the load is dispatched in units of macroband.

**TABLE DES MATIÈRES**

DÉDICACE . . . . .	iv
RÉSUMÉ . . . . .	v
ABSTRACT . . . . .	vii
TABLE DES MATIÈRES . . . . .	ix
LISTE DES FIGURES . . . . .	xii
LISTE DES TABLEAUX . . . . .	xv
LISTE DES ANNEXES . . . . .	xviii
INTRODUCTION . . . . .	1
0.1 Mécanisme de base . . . . .	2
0.2 Différentes variantes . . . . .	4
0.3 Performance et technique d'accélération . . . . .	16
CHAPITRE 1 MÉTHODE DES CARACTÉRISTIQUES . . . . .	18
1.1 Discrétisation des variables . . . . .	18
1.2 Résolution sur une ligne d'intégration . . . . .	31
1.3 Conservation des neutrons et résolution dans un domaine physique . . . . .	33
1.4 Conservation des neutrons et conditions aux limites . . . . .	36
1.5 Solution multigroupe . . . . .	39



CHAPITRE 2	MÉTHODES D'ACCÉLÉRATION . . . . .	50
2.1	Introduction . . . . .	50
2.2	Comparaison des techniques d'accélération utilisées dans le code DRAGON . . . . .	51
2.3	Techniques d'accélération pour la méthode des caractéristiques . . .	54
2.4	Fusionnement des lignes . . . . .	60
2.5	Équivalence entre la méthode des caractéristiques et la méthode des probabilités de collision . . . . .	68
2.6	Accélération de <i>Self-Collision Rebalancing</i> . . . . .	74
2.7	Autres techniques utilisées . . . . .	78
CHAPITRE 3	PARALLÉLISATION . . . . .	81
3.1	Introduction . . . . .	81
3.2	Conception de la parallélisation par lignes . . . . .	82
3.2.1	Temps de calcul sur une ligne d'intégration . . . . .	83
3.2.2	Temps de communication . . . . .	86
3.2.3	Répartition de la charge . . . . .	89
3.3	Conception de la parallélisation par macrobandes . . . . .	91
3.3.1	Illustrations des macrobandes dans deux géométries simples	91
3.3.2	Réalisation des macrobandes . . . . .	95
3.3.3	Avantages des macrobandes . . . . .	98
3.3.4	Temps de calcul et temps de communication . . . . .	99
3.3.5	Répartition de la charge . . . . .	100
3.4	Utilitaires parallèles dans la librairie GANLIB . . . . .	101

CHAPITRE 4	RÉSULTATS NUMÉRIQUES . . . . .	104
4.1	Introduction . . . . .	104
4.1.1	Critères de validation . . . . .	105
4.2	Barres de compensation . . . . .	105
4.2.1	Description du problème . . . . .	106
4.2.2	Options de calcul . . . . .	108
4.2.3	Validation de l'approximation exponentielle . . . . .	110
4.2.4	Validation de la technique SCR . . . . .	110
4.2.5	Validation de la technique TMT . . . . .	112
4.2.6	Maillage raffiné contre maillage normal . . . . .	121
4.2.7	Performance séquentielle de MCI . . . . .	125
4.2.8	Calcul de <i>burnup</i> . . . . .	135
4.2.9	Performance parallèle de MCI . . . . .	136
4.3	Barres liquides de G2 . . . . .	159
4.4	Coefficient de Doppler . . . . .	160
	CONCLUSION . . . . .	165
	RÉFÉRENCES . . . . .	169
	ANNEXES . . . . .	174

# LISTE DES FIGURES

Figure 0.1	X-Y cellule pour la description de la méthode Takeuchi. . . . .	5
Figure 0.2	X-Y cellule pour la description de la méthode de Wagner. . . . .	7
Figure 0.3	Une ligne cyclique dans un domaine rectangulaire. . . . .	10
Figure 0.4	Une cellule 2D couverte par des lignes de caractéristiques. . . . .	11
Figure 0.5	Une cellule 2D divisée en deux régions. . . . .	14
Figure 1.1	Une ligne caractéristique. . . . .	19
Figure 1.2	Quadrature $EQ_4$ . . . . .	23
Figure 1.3	Trois bases pour la quadrature planaire. . . . .	26
Figure 1.4	Volume estimé $V'_j(\hat{\Omega}_t)$ pour la direction $\hat{\Omega}_t$ . . . . .	28
Figure 1.5	Élément d'intégration de surface. . . . .	31
Figure 1.6	Schéma d'itération multigroupe . . . . .	49
Figure 2.1	Fusionnement des lignes d'intégration. . . . .	62
Figure 2.2	Ligne virtuelle dans un fusionnement au niveau 2. . . . .	63
Figure 3.1	Les macrobandes d'une cube pour une direction $\hat{\Omega}$ donnée. . . . .	93
Figure 3.2	Les macrobandes d'une cube avec cylindre pour une direction $\hat{\Omega}$ donnée . . . . .	94
Figure 3.3	Génération des lignes pour des macrobandes dans la direction $\hat{\Omega}$ . . . . .	97
Figure 3.4	La visibilité des régions . . . . .	99
Figure 3.5	Utilitaires parallèle dans DRAGON . . . . .	102
Figure 4.1	Supercellule d'une barre de compensation de Gentilly-2 . . . . .	107

Figure 4.2	Précision contre itération pour les six types de barres de compensation . . . . .	113
Figure 4.2	Précision contre itération pour les six types de barres de compensation (suite) . . . . .	114
Figure 4.2	Précision contre itération pour les six types de barres de compensation (suite et fin) . . . . .	115
Figure 4.3	Laplacien géométrique pour le calcul de <i>burnup</i> pour les six type de barre de compensation . . . . .	137
Figure 4.3	Laplacien géométrique pour le calcul de <i>burnup</i> pour les six type de barre de compensation (suite) . . . . .	138
Figure 4.3	Laplacien géométrique pour le calcul de <i>burnup</i> pour les six type de barre de compensation (suite et fin) . . . . .	139
Figure 4.4	Temps de calcul moyen pour chaque période de séjour durant un calcul de <i>burnup</i> des barres de compensation . . . . .	140
Figure 4.5	Calculs parallèles d'une barre de compensation de type BCAINT sur le maillage normal avec la densité de 2.5 lignes/cm <sup>2</sup> . . .	147
Figure 4.6	Calculs parallèles d'une barre de compensation de type BCAINT sur le maillage normal avec la densité de 4.0 lignes/cm <sup>2</sup> . . .	148
Figure 4.7	Calculs parallèles d'une barre de compensation de type BCAINT sur le maillage normal avec la densité de 10.0 lignes/cm <sup>2</sup> . . .	149
Figure 4.8	Équilibre de la charge pour le calcul parallèle à 12 processeurs avec option SPLT de BCAINT (maillage normal avec la densité de 4.0 lignes/cm <sup>2</sup> ) . . . . .	152

Figure 4.9	Équilibre de la charge pour le calcul parallèle à 12 processeurs avec option STRD de BCAINT (maillage normal avec la densité de 4.0 lignes/cm <sup>2</sup> ) . . . . .	153
Figure 4.10	Équilibre de la charge pour le calcul parallèle à 12 processeurs avec option MCRB de BCAINT (maillage normal avec la densité de 4.0 lignes/cm <sup>2</sup> , lignes originales) . . . . .	154
Figure 4.11	Équilibre de la charge pour le calcul parallèle à 24 processeurs avec option SPLT de BCAINT (maillage normal avec la densité de 4.0 lignes/cm <sup>2</sup> ) . . . . .	156
Figure 4.12	Équilibre de la charge pour le calcul parallèle à 24 processeurs avec option STRD de BCAINT (maillage normal avec la densité de 4.0 lignes/cm <sup>2</sup> ) . . . . .	157
Figure 4.13	Équilibre de la charge pour le calcul parallèle à 24 processeurs avec option MCRB de BCAINT (maillage normal avec la densité de 4.0 lignes/cm <sup>2</sup> , lignes originales) . . . . .	158
Figure 4.14	Évolution du temps de communication par rapport au nombre de processeurs actifs pour le calcul parallèle de BCAINT. (maillage normal avec la densité de 4.0 lignes/cm <sup>2</sup> , lignes originales) . . . . .	158
Figure 4.15	Géométrie d'une cellule PWR . . . . .	163

## LISTE DES TABLEAUX

Tableau 2.1	Erreur absolue sur les approches d'exponentielle . . . . .	79
Tableau 3.1	Nombre d'opérations sur un segment dans deux directions . .	85
Tableau 3.2	Paramètres typiques pour le temps de communication . . . .	87
Tableau 4.1	Valeurs de $\Delta\Sigma$ d'une barre de compensation de type BCAINT pour valider l'approximation exponentielle par l'interpolation	111
Tableau 4.2	Valeurs de $\Delta\Sigma$ pour une barre de compensation de type BCAINT (maillage normal) . . . . .	117
Tableau 4.3	Valeurs de $\Delta\Sigma$ pour une barre de compensation de type BCAOUT (maillage normal) . . . . .	118
Tableau 4.4	Valeurs de $\Delta\Sigma$ pour une barre de compensation de type BCBINT (maillage normal) . . . . .	118
Tableau 4.5	Valeurs de $\Delta\Sigma$ pour une barre de compensation de type BCCINT (maillage normal) . . . . .	119
Tableau 4.6	Valeurs de $\Delta\Sigma$ pour une barre de compensation de type BCCOUT (maillage normal) . . . . .	119
Tableau 4.7	Valeurs de $\Delta\Sigma$ pour une barre de compensation de type BCDINT (maillage normal) . . . . .	120
Tableau 4.8	Valeur de $\Delta\Sigma_{50}^{22}$ pour une barre de compensation de type BCCOUT . . . . .	120
Tableau 4.9	Valeurs de $\Delta\Sigma$ pour une barre de compensation de type BCAINT (maillage raffiné) . . . . .	121
Tableau 4.10	Valeurs de $\Delta\Sigma$ pour une barre de compensation de type BCAINT (maillage raffiné) . . . . .	122

Tableau 4.11	Valeurs de $\Delta\Sigma$ pour une barre de compensation de type BCBINT . . . . .	122
Tableau 4.12	Valeurs de $\Delta\Sigma$ pour une barre de compensation de type BCCINT (maillage raffiné) . . . . .	123
Tableau 4.13	Valeurs de $\Delta\Sigma$ pour une barre de compensation de type BCCOUT (maillage raffiné) . . . . .	123
Tableau 4.14	Valeurs de $\Delta\Sigma$ pour une barre de compensation de type BCDINT (maillage raffiné) . . . . .	124
Tableau 4.15	Valeurs de $\Delta\Sigma$ pour la barre de compensation de type BCAINT . . . . .	125
Tableau 4.16	Valeurs de $\Delta\Sigma$ pour la barre de compensation de type BCAOUT . . . . .	126
Tableau 4.17	Valeurs de $\Delta\Sigma$ pour la barre de compensation de type BCBINT . . . . .	127
Tableau 4.18	Valeurs de $\Delta\Sigma$ pour la barre de compensation de type BCCINT . . . . .	128
Tableau 4.19	Valeurs de $\Delta\Sigma$ pour la barre de compensation de type BCCOUT . . . . .	129
Tableau 4.20	Valeurs de $\Delta\Sigma$ pour la barre de compensation de type BCDINT . . . . .	130
Tableau 4.21	Nombre total d'itérations interne pour les calculs de $\Delta\Sigma$ des six types de barre de compensation . . . . .	131
Tableau 4.22	Temps de calcul (secondes) des barres de compensation sur le maillage normal . . . . .	133
Tableau 4.23	Nombre de lignes d'intégration avant et après le fusionnement	134

Tableau 4.24	Analyse du temps de calcul sur un maillage raffiné . . . . .	135
Tableau 4.25	Nombre moyen de lignes utilisées par processeur . . . . .	143
Tableau 4.26	Valeurs de $\Delta\Sigma$ pour les barres liquide (vide) . . . . .	161
Tableau 4.27	Valeurs de $\Delta\Sigma$ pour les barres liquide (rempli d'eau) . . . . .	162
Tableau 4.28	Comparaison de mémoire alloué entre module EXCELL et module MCI . . . . .	162
Tableau 4.29	Valeurs propres obtenues par MCI et EXCELL . . . . .	164



**LISTE DES ANNEXES**

ANNEXE I	ACCÉLÉRATION À UN PARAMÈTRE . . . . .	174
ANNEXE II	FICHIERS D'ENTRÉE POUR LE SOLVEUR MCI . . . . .	177
II.1	Fichier d'entrée principale . . . . .	177
II.2	Fichier GeoRd6.c2m . . . . .	180
II.3	Fichier FluPvm.c2m . . . . .	184
ANNEXE III	MODE D'UTILISATION . . . . .	189
III.1	The TCHTRK: module . . . . .	189
III.2	The MCI: module . . . . .	191

## INTRODUCTION

Le principe de la méthode des caractéristiques permet de résoudre l'équation de transport analytiquement le long des trajectoires des neutrons. Cette méthode a commencé à être utilisée dans le domaine du nucléaire dans les années soixante. Deux approches coexistent: "caractéristiques courtes" et "caractéristiques longues". La première approche est plutôt utilisée dans les problèmes de protection ou de pénétration profonde ("shielding or deep-penetration"). La géométrie utilisée est régulière et les inconnues se trouvent souvent aux interfaces cellulaires. Les trajectoires utilisées sont limitées dans une cellule. Les inconnues sur les interfaces servent à enchaîner le calcul d'une cellule à l'autre. La deuxième approche est plus générale dans le sens que la géométrie peut être beaucoup plus complexe. Les trajectoires peuvent éventuellement traverser le domaine entier. Au fil des ans, plusieurs codes de calcul ont été développés se basant sur la méthode des caractéristiques grâce à ses nombreux avantages:

- Tout comme la méthode des probabilités de collisions et la méthode de Monte Carlo, la formalisation de la méthode des caractéristiques offre une grande flexibilité envers la géométrie du problème pouvant être traité;
- Le flux scalaire est reconstruit après chaque balayage du système des caractéristiques. La mémoire nécessaire pour effectuer un calcul est grandement réduite par rapport à la méthode des probabilités des collisions.

Le but de ce chapitre est d'introduire les principaux concepts sous-jacents à la méthode des caractéristiques. Nous allons montrer brièvement la base de cette méthode dans la section 0.1 et nous parlerons de quelques variantes de cette méthode dans la section 0.2.

### 0.1 Mécanisme de base

Pour introduire la méthode des caractéristiques telle qu'elle peut être utilisée dans les calculs neutroniques, nous commençons par écrire l'équation du transport des neutrons dans le plus simple cas, i.e. un problème stationnaire, mono-énergétique à source isotrope:

$$\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}) + \Sigma(\vec{r}) \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}) = Q(\vec{r}) \quad (0.1)$$

où

$\vec{r}$  et  $\hat{\Omega}$  sont la position et la direction unitaire de propagation des neutrons respectivement.

$\Sigma(\vec{r})$  est la section efficace totale.

$Q(\vec{r})$  est la source isotrope.

-  $\phi(\vec{r}, \hat{\Omega})$  est le flux angulaire dans la direction  $\hat{\Omega}$ .

Soit  $\vec{T}(\vec{p}, \hat{\Omega})$  une ligne infinie à partir d'un certain point  $\vec{p}$  qui se propage dans la direction  $\hat{\Omega}$ , la projection de l'équation (0.1) sur la ligne  $\vec{T}$  s'écrit comme suit:

$$\frac{d\phi(s, \hat{\Omega})}{ds} + \Sigma(s) \phi(s, \hat{\Omega}) = Q(s) \quad (0.2)$$

où  $s$  mesure la distance sur la ligne  $\vec{T}$  définie par:

$$s = \hat{\Omega} \cdot (\vec{r} - \vec{p}), \quad \forall \vec{r} \in \vec{T}(\vec{p}, \hat{\Omega}). \quad (0.3)$$

Nous allons maintenant résoudre l'équation (0.2) sur l'intervalle  $[\vec{r}_a, \vec{r}_b]$  tout en supposant la connaissance du flux entrant  $\phi(s_a, \hat{\Omega})$ . Pour ce faire, nous allons utiliser la méthode de Lagrange. Nous allons omettre la variable  $\hat{\Omega}$  durant la

résolution de l'équation (0.2) afin de ne pas trop alourdir l'écriture. D'abord, la forme homogène de l'équation (0.2), i.e.  $Q(s) = 0$ , nous conduit à la solution homogène suivante:

$$\phi^h(s) = C e^{-\tau(s_a, s)}. \quad (0.4)$$

où la fonction  $\tau(\cdot, \cdot)$  définie par:

$$\tau(s_1, s_2) = \tau(\vec{p} + s_1 \hat{\Omega}, \vec{p} + s_2 \hat{\Omega}) = \int_{s_1}^{s_2} \Sigma(s) ds. \quad (0.5)$$

mesure la distance optique en libre parcours moyen ("mean free path") entre les points  $\vec{p} + s_1 \hat{\Omega}$  et  $\vec{p} + s_2 \hat{\Omega}$ . Remarquons que nous rencontrons toujours des régions homogènes dans la pratique, alors la distance optique  $\tau(s_1, s_2)$  est souvent calculée par le produit de la section efficace et la distance physique,  $\Sigma \cdot (s_2 - s_1)$ , ou par une simple sommation de plusieurs termes de ce genre de produit dans le cas où l'intervalle  $[s_1, s_2]$  rencontre plusieurs régions homogènes. Ensuite, nous appliquons la solution homogène (0.4) dans l'équation (0.2) tout en substituant la constante  $C$  par une fonction  $C(s)$  en  $s$  (principe de la variation des constantes). Cette manoeuvre nous conduit à l'équation suivante:

$$\frac{dC(s)}{ds} = Q(s) e^{\tau(s_a, s)} \quad (0.6)$$

Si nous intégrons l'équation ci-dessus de  $s_a$  jusqu'à  $s$ , nous obtenons:

$$C(s) = \int_{s_a}^s Q(s') e^{\tau(s_a, s')} + C_a. \quad (0.7)$$

Nous fixons la constante  $C_a$  en exigeant l'égalité  $\phi(s_a) \equiv C(s_a)$ , ce qui donne alors la solution générale de l'équation (0.2) suivante:

$$\phi(s) = \int_{s_a}^s Q(s') e^{-\tau(s',s)} ds' + \phi(s_a) e^{-\tau(s_a,s)}. \quad (0.8)$$

## 0.2 Différentes variantes

### La méthode de Takeuchi

Cette méthode a été développée par K. Takeuchi pour des géométries à deux dimensions (SASAMOTO N. and TAKEUCHI K., 1979). La figure 0.1 montre une cellule homogène rectangulaire de longueur  $h_x$  et de hauteur  $h_y$ . Pour raison de simplicité, nous utilisons les symboles A, B, C, D, E au lieu de  $\vec{r}_A$ ,  $\vec{r}_B$ ,  $\vec{r}_C$ ,  $\vec{r}_D$ ,  $\vec{r}_E$  pour indiquer les sommets de la cellule. Dans la méthode de Takeuchi, les principales inconnues sont les valeurs du flux angulaire sur les sommets des cellules. Dans cet exemple illustré, nous supposons que les valeurs du flux angulaire dans la direction  $\hat{\Omega}$  sont connues aux sommets A, B, et C, et que les valeurs de sources sont connues aux sommets A, B, C, et D. Nous cherchons à connaître le flux angulaire dans la direction  $\hat{\Omega}$  sur le sommet D. En traçant une ligne caractéristique dans la direction  $\hat{\Omega}$  passant par le sommet D, nous obtenons un nouveau point E qui est le point d'intersection de la ligne caractéristique avec une des quatre arêtes de la cellule.

En appliquant l'équation (0.8) sur le segment  $\overline{ED}$ , nous obtenons:

$$\phi(D, \hat{\Omega}) = \phi(E, \hat{\Omega}) e^{-\Sigma L} + \int_0^L Q(s) e^{-\Sigma s} ds \quad (0.9)$$

où  $L$  est la longueur du segment  $\overline{ED}$ . La valeur du flux angulaire au point E est

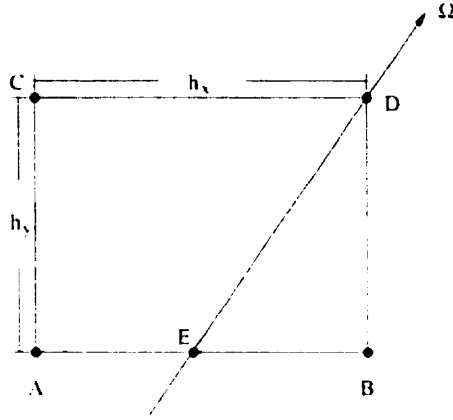


Figure 0.1 X-Y cell pour la description de la méthode Takeuchi.

obtenue par l'interpolation linéaire suivante:

$$\phi(E, \vec{\Omega}) = \rho \phi(A, \vec{\Omega}) + (1 - \rho) \phi(B, \vec{\Omega}) \quad (0.10)$$

avec

$$\rho = \frac{\mu}{\eta} \frac{h_y}{h_x}. \quad (0.11)$$

où  $\mu$  et  $\eta$  sont des cosinus directeurs de  $\vec{\Omega}$  dans les directions  $X$  et  $Y$  respectivement. Pour pouvoir évaluer le terme d'intégration dans l'équation (0.10), la source  $Q(s)$  est supposée être aussi linéaire le long la ligne  $\overline{ED}$ , i.e.

$$Q(s) = \frac{s}{L} Q(D) + (1 - \frac{s}{L}) Q(E). \quad (0.12)$$

Encore une fois, la source sur le point E est calculée par une formule d'interpolation linéaire à partir de celles sur les sommets A et B:

$$Q(E) = \rho Q(A) + (1 - \rho) Q(B). \quad (0.13)$$

Bien que la représentation linéaire de la source ait conduit aux résultats numériques précis par cette approche (ALCOUFFE R. E. and LARSEN E. W., 1981). Sasamoto et Takeuchi ont envisagé une variation exponentielle en source et ont obtenu d'excellents résultats (SASAMOTO N. and TAKEUCHI K., 1979). Remarquons que, dans cette approche, les directions  $\hat{\Omega}$  des caractéristiques peuvent être choisies indépendamment du maillage spatial. Par conséquent, toutes les quadratures angulaires utilisées dans les codes  $S_N$  peuvent être utilisées. Alcouffe fait toutefois remarquer que, malheureusement, la méthode ne satisfait pas l'équation de balance et que la conservation des neutrons n'est pas strictement garantie indépendamment de la taille du maillage (ALCOUFFE R. E. and LARSEN E. W., 1981). Nous rappelons qu'il a été historiquement considéré crucial de satisfaire l'équation de balance cellulaire pour l'utilisation des méthodes d'accélération et pour la précision des résultats numériques.

### **La méthode de Wagner-Sargis-Cohen**

Cette méthode, connue aussi sous le nom "Direct-Coupled-Ray Method" (DCR), a été développée pour résoudre des problèmes à trois dimensions avec un maillage spatial uniforme (WAGNER M. R. et al., 1970; BUCHOLZ J. A. and PONCELET C. G., 1977). Nous allons la présenter en deux dimensions, encore une fois pour raison de simplicité, en utilisant la figure 0.2. Le maillage spatial doit être formé par des rectangles uniformes ayant tous les mêmes longueurs  $h_x$  et les mêmes hauteurs  $h_y$ . Cette contrainte sur le maillage spatial permet de choisir des lignes caractéristiques très spécifiques. Comme illustré dans la figure 0.2, seulement les lignes qui rejoignent des sommets diagonales et celles qui rejoignent des centres des arêtes parallèles sont utilisées. Par conséquent, la quadrature angulaire est fixée. Il y a donc huit et quatorze directions respectivement en deux et trois dimensions. Les avantages de cette approche sont les suivantes:

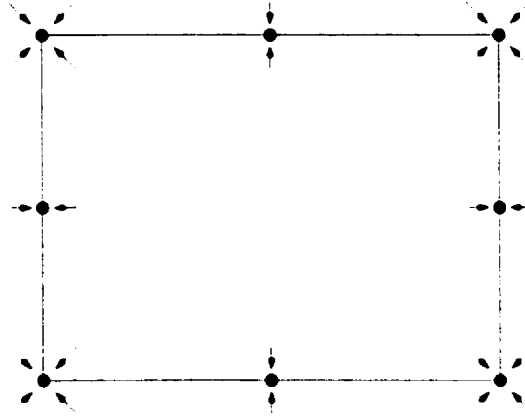


Figure 0.2 X-Y cellule pour la description de la méthode de Wagner.

Chaque ligne caractéristique traverse le domaine au complet. Au contraire de la méthode de Takeuchi, l'interpolation du flux sur des interfaces internes n'est plus nécessaire pour enchaîner le calcul de cellule en cellule.

Pour une direction donnée, le même facteur d'atténuation exponentiel est utilisé pour toutes les cellules ayant le même matériel. l'effort de calcul est ainsi minimisé.

Après avoir calculé l'équation du transport dans chaque direction, le flux scalaire  $\phi$  est calculé comme suit:

$$\phi = \sum_{i=1}^M \omega_i \bar{\phi}_i \quad (0.14)$$

où  $M$  est le nombre de directions.  $M = 8$  en 2D et  $M = 14$  en 3D.  $\omega_i$  le poids associé à la direction  $\hat{\Omega}_i$ , et  $\bar{\phi}_i$  la moyenne du flux angulaire sur la ligne caractéristique de direction  $\hat{\Omega}_i$ . Les poids de direction  $\omega_i$  peuvent être choisis librement en respectant les conditions de symétrie et de normalisation. Remarquons par contre le manque de sommation sur la variable spatiale dans l'équation (0.14). Comme pour chaque cellule, il n'y a qu'une seule ligne par direction qui la traverse, la sommation spatiale



est faite implicitement en associant à chaque ligne le poids d'une cellule.

Cette méthode utilise une approche de source constante dans toutes les cellules. L'intégration sur la source peut très facilement être réalisée le long des lignes caractéristiques utilisées. En substituant  $\bar{\phi}_i$  par des résultats intermédiaires dans l'équation (0.14), l'expression du flux scalaire est réorganisée de façon à respecter la balance des neutrons dans chaque cellule (BUCHOLZ J. A. and PONCELET C. G., 1977).

Cette méthode simple, positive et rapide s'est avérée très utile pour les problèmes de pénétration profonde, car ces problèmes sont souvent bien décrits par un maillage uniforme en rectangles. Par contre, la précision de cette méthode est limitée à cause de l'hypothèse de source constante et de la contrainte sévère envers le choix des directions pouvant être utilisées. En fait, quand la diffusion apporte une contribution importante à la source, des cellules de petite taille doivent être utilisées. La contrainte forte sur les directions de caractéristiques conduit aussi à une perte de précision dans les régions vides puisqu'il y aura mauvaise estimation des termes de fuite. De plus, s'il y a un couloir vide dans une des directions (ou près d'une des directions) imposées, la méthode sera inefficace.

### **La méthode de Askew**

Cette méthode a été développée par Askew indépendamment des méthodes présentées ci-dessus (ASKEW J. R., 1972). Elle est implantée dans le code CACTUS pour résoudre l'équation du transport en multigroupe dans une géométrie assez générale en deux dimensions (HALSALL M. J., 1980). La seule contrainte sur la géométrie est que le domaine doit être un rectangle. À l'intérieur de ce domaine rectangulaire, une combinaison arbitraire des lignes droites et des arcs circulaires croisées peut être utilisée pour spécifier la géométrie du problème. Les

conditions aux limites de type de réflexion spéculaire et de type périodique sont traitées. Dans le cas de réflexion spéculaire, les caractéristiques cycliques sont utilisées. Comme illustrée dans la figure 0.3, une trajectoire des neutrons, i.e. une ligne caractéristique, est reflétée quand elle rencontre une surface externe. Les directions des lignes caractéristiques sont choisies de sorte que chaque ligne retrouve son point de départ après un certain nombre de réflexions. Ainsi, un neutron qui suit une telle ligne cyclique peut traverser autant de fois possible la même région de façon périodique. Grâce à cette propriété périodique, le calcul du flux angulaire dans l'équation (0.2) peut être restreint sur une seule période en imposant la condition de périodicité suivante (ROY R., 1998a):

$$\phi(S, \vec{\Omega}) = \phi(0, \vec{\Omega}) \quad (0.15)$$

où  $S$  est la période sur la ligne caractéristique en question. Pour chaque direction, les lignes caractéristiques sont généralement tracées de façon équidistante. Les sources dans chaque région sont supposées homogènes. La longueur des segments est normalisée pour respecter le vrai volume de chaque région. La méthode développée dans cette thèse rassemble un certain nombre d'idées pratiques de l'approche d'Askew.

### **La méthode de Filipone**

La méthode de Filipone, appelée aussi la méthode de "Streaming Ray", a été développée pour donner une description précise de la fuite des neutrons le long des conduites ("duct") des réacteurs de fusion (FILIPONE W. L. and WOOLF S., 1979). Bien qu'elle ait été initialement implantée sur un maillage uniforme à deux dimensions afin de minimiser l'effort de calcul des exponentielles, elle a ensuite été généralisée pour le calcul dynamique en trois dimensions (FILIPONE W. L.

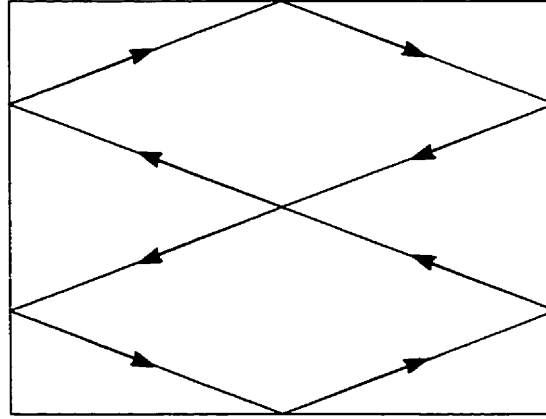


Figure 0.3 Une ligne cyclique dans un domaine rectangulaire.

and WOOLF S., 1981). La méthode de "Streaming Ray" combine la méthode des caractéristiques avec la méthode des différences finies.

Soit  $V$  une cellule dans un maillage 2D uniforme, soient  $G$ ,  $D$ ,  $B$  et  $H$  ses quatre arêtes, comme illustré dans la figure 0.4. pour la direction de propagation  $\hat{\Omega}$ , les neutrons entrent dans  $V$  par les arêtes  $G$  et  $B$ , et en sortent par  $D$  et  $H$ . Le terme source est supposé constant dans  $V$  (source homogène) et le flux angulaire est divisé en deux parties:

$$\phi(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \phi_0(\vec{r}, \hat{\Omega}) + \phi_1(\vec{r}, \hat{\Omega}). \quad (0.16)$$

où  $\phi_0(\vec{r}, \hat{\Omega})$  et  $\phi_1(\vec{r}, \hat{\Omega})$  vérifient respectivement l'équation homogène (flux entrant nul) et l'équation sans source. Ces deux équations sont traitées séparément en utilisant différentes techniques de résolution. L'équation homogène est résolue avec la méthode des différences finies de type diamant alors que l'équation sans source est traitée par la méthode des caractéristiques.

L'application de la méthode de différences finies à l'équation homogène conduit

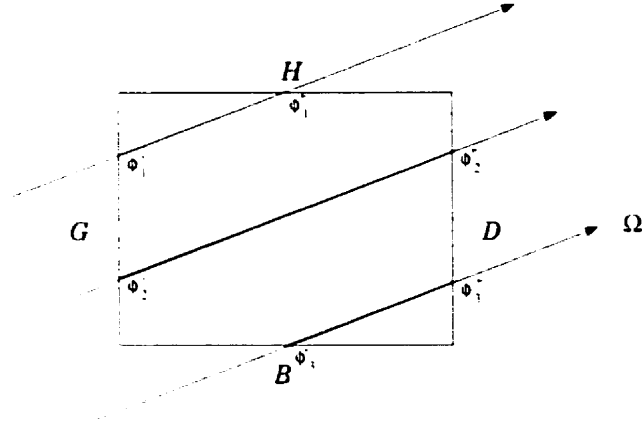


Figure 0.4 Une cellule 2D couverte par des lignes de caractéristiques.

à (LEWIS E. E. and MILLER W. F., Jr., 1984):

$$\phi_{0,V} = \frac{Q}{\Sigma + \frac{2\mu}{h_x} + \frac{2\eta}{h_y}} \quad (0.17)$$

$$\phi_{0,H} = \phi_{0,D} = 2\phi_{0,V}. \quad (0.18)$$

où

- $\mu$  et  $\eta$  sont les cosinus directeurs axiaux,
- $h_x$  et  $h_y$  sont les longueurs et largeurs de la cellule,
- $\phi_{0,H}$  et  $\phi_{0,D}$  sont les valeurs moyennes du flux angulaire sur les surfaces  $H$  et  $D$  respectivement,
- $\phi_{0,V}$  est la valeur moyenne du flux angulaire dans la cellule  $V$ ,
- $\Sigma$  et  $Q$  sont la section efficace moyenne et la source moyenne respectivement.

Remarquons que, grâce aux conditions du flux entrant nul (dans notre exemple,  $\phi_{0,X} = 0$  pour  $X = B, G$ ), la solution ci-dessus est strictement positive moyennant une source positive.

L'équation sans source est résolue en suivant les lignes caractéristiques. Pour une direction donnée  $\hat{\Omega}$ , des lignes parallèles ("lignes caractéristiques") sont tracées en traversant la cellule  $V_j$ . Chaque ligne est associée à un poids (voir figure 0.4). Soit  $\phi_{1,i}^-$  le flux entrant suivant la ligne  $i$ , en utilisant la formule (0.8), nous obtenons facilement le flux sortant correspondant:

$$\phi_{1,i}^+ = \phi_{1,i}^- e^{-\Sigma L_i} \quad (0.19)$$

où  $L_i$  est la longueur de la ligne  $i$ . En fait, nous avons:

$$\phi_{1,i}^+ = \phi_i^- \quad (0.20)$$

car le flux entrant est nul pour l'équation homogène. La valeur moyenne du flux caractéristiques  $\phi_{1,V}$  peut être obtenue en faisant d'abord la moyenne sur chaque ligne et en suite sur toute la cellule en considérant les poids des lignes. Alors le flux moyen de la cellule et les flux sortants sur les lignes sont donnés par:

$$\phi_V = \phi_{0,V} + \phi_{1,V} \quad (0.21)$$

$$\phi_i^+ = \phi_{1,i}^+ + \phi_{0,X} \quad (0.22)$$

où  $\phi_{0,X}$  est le flux moyen de la solution homogène sur la surface appropriée (dans la figure 0.4,  $X = H$  pour  $i = 1$ , et  $X = D$  pour  $i = 2, 3$ ).

Sur la même ligne  $i$ , le flux sortant  $\phi_i^+$  d'une cellule est utilisée comme flux entrant dans la prochaine cellule rencontrée par la ligne. Nous n'avons pas utilisé les signes + et - pour désigner les flux entrant et sortant dans l'équation homogène, car il est suffisamment claire ainsi.

L'approche de Filipone permet d'utiliser différentes quadratures angulaires pour chacune des deux méthodes impliquées. Comme le flux entrant de surfaces introduit

une correction angulaire plus importante par rapport au flux d'une source isotrope de la région, il est donc souvent préférable d'utiliser une quadrature angulaire plus raffinée dans la résolution de l'équation sans source que dans celle de l'équation avec flux entrant nul. Cette remarque est importante, car la fuite dans une région vide peut être traitée d'une façon beaucoup plus précise. La méthode de "Streaming Ray" offre donc plus de précision que la méthode  $S_N$  surtout pour des problèmes de pénétration profonde et de fuite dans les régions vides. Mais malheureusement, cette méthode ne satisfait pas explicitement l'équation de balance (ALCOUFFE R. E. and LARSEN E. W., 1981).

### La méthode de Larsen

Basée sur le calcul exact de la solution d'un problème cellulaire, Larsen et Alcouffe ont introduit une autre approche de la méthode des caractéristiques nommée la méthode de caractéristique linéaire ("linear characteristic") (LARSEN E. W. and ALCOUFFE R. E., 1981). Les conditions aux limites et la source sont supposées linéaires. Les symboles utilisés ont les mêmes significations que dans les sous-sections précédentes, la source  $Q(x, y)$  et les flux interfaces,  $\phi(0, y)$  et  $\phi(x, 0)$ , sont représentés explicitement en polynômes linéaires. Nous cherchons donc à résoudre l'équation suivante:

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial x} + \eta \frac{\partial \phi}{\partial y} + \Sigma \phi = Q_V + (x - \frac{h_x}{2})Q_x + (y - \frac{h_y}{2})Q_y \quad (0.23)$$

$$\phi(0, y) = \phi_G + (y - \frac{h_y}{2})\theta_G \quad (0.24)$$

$$\phi(x, 0) = \phi_B + (x - \frac{h_x}{2})\theta_B \quad (0.25)$$

La cellule est divisée en deux régions comme illustrée dans la figure 0.5. La solution exacte  $\phi(x, y)$  de (0.23)-(0.25), qui contient le produit d'un polynôme de

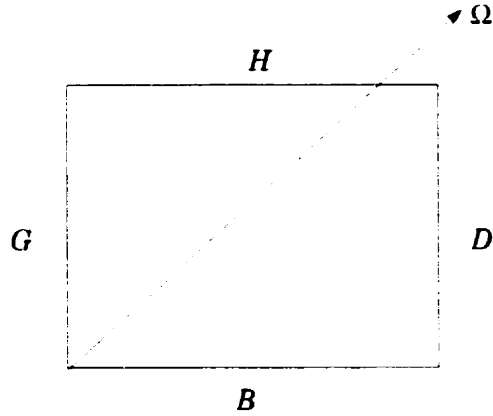


Figure 0.5 Une cellule 2D divisée en deux régions.

premier ordre et une exponentielle, est donnée en appliquant la formule (0.8) dans chacune des deux régions. Remarquons qu'il n'y a pas de lignes caractéristiques explicites comme dans les autres approches. Il n'est donc pas nécessaire d'introduire un schéma de normalisation pour les lignes caractéristiques. De ce point de vue, la résolution est exacte dans toute la cellule pour cette méthode alors que, pour les autres méthodes, elle est seulement exacte sur les lignes caractéristiques explicitement tracées.

Afin de générer les conditions aux limites pour les cellules voisines, nous devons représenter le flux sortant de la cellule sous une expression linéaire comme suit:

$$\phi(h_x, y) \approx \phi_D + (y - \frac{h_y}{2})\theta_D \quad (0.26)$$

$$\phi(x, h_y) \approx \phi_H + (x - \frac{h_x}{2})\theta_H \quad (0.27)$$

Les coefficients  $\phi_X$  et  $\theta_X$ , pour  $X = D, H$ , peuvent être choisis afin de respecter exactement les deux premiers moments de la solution analytique  $\phi(x, y)$  sur les arêtes en haut et à droite. Cette approche a été considérée trop coûteuse en temps de CPU. Un autre schéma, qui respecte approximativement le moment spatial

d'ordre 1, a alors été proposé par Larsen et Alcouffe (1981).

Il faut aussi reconstruire la source linéaire pour la prochaine itération à partir de la solution exacte du flux. Deux solutions sont proposées par les auteurs de la méthode. La première consiste à représenter la solution exacte par une expression linéaire comme suit:

$$\phi(x, y) \approx \phi_V + (x - \frac{h_x}{2})\phi_x + (y - \frac{h_y}{2})\phi_y \quad (0.28)$$

où  $\phi_V$ ,  $\phi_x$ , et  $\phi_y$  sont déterminés en utilisant les équations de balance des premiers ordres. La source linéaire est ensuite construite à partir de la représentation linéaire ci-dessus. La deuxième solution consiste à reconstruire la source par la formule suivante:

$$Q(x, y) = Q_V^* \left[ \alpha + (x - \frac{h_x}{2})\beta + (y - \frac{h_y}{2})\gamma \right], \quad (0.29)$$

où  $Q_V^*$  désigne la source homogène calculée à partir de  $\phi_V$ , le moment d'ordre zéro du flux exact  $\phi(x, y)$ . Les constantes  $\alpha$ ,  $\beta$ , et  $\gamma$  dans l'équation ci-dessus sont calculées en utilisant la solution exacte  $\phi(x, y)$  et la solution du problème de la diffusion. À cause de sa relation intrinsèque avec la méthode d'accélération DSA ("Diffusion Synthetic Acceleration"), la deuxième solution est préférable par rapport à la première.

Cette méthode ne peut pratiquement pas être appliquée dans une géométrie courbée, car les solutions analytiques des problèmes cellulaires consistent en fonctions plus complexes qu'un simple produit d'un polynôme avec une exponentielle. En plus, les expressions analytiques sur les interfaces et dans la cellule ne sont plus possibles. Un autre inconvénient de cette méthode provient du fait que la solution obtenues n'est pas toujours positive. Dans le cas où certaines valeurs numériques du flux sont négatives, il faut imposer des contraintes de positivité.



### 0.3 Performance et technique d'accélération

La performance de ces approches caractéristiques est très partagée selon la nature de chacune. De façon générale, les approches basées sur un maillage uniforme sont plus performantes que celles développées pour une géométrie complexe, car les particularités géométriques sont prises en compte pour en tirer le maximum de performance. Par exemple, en utilisant des lignes caractéristiques bien particulières sur un maillage uniforme, la méthode de Wagner permet de calculer un seul facteur d'atténuation exponentiel par matériel et par direction. Par contre, le problème de performance est plus sévère si des géométries complexes doivent être traitées. Dans le code CACTUS, les techniques suivantes sont utilisées pour augmenter la performance de code (HALSALL M. J., 1980):

- Au lieu de recalculer les exponentielles à chaque itération, elles sont calculées une seule fois et stockées dans un fichier à accès direct.
- Après chaque itération interne, les propriétés nucléaires sont homogénéisés et un calcul  $K_{\text{eff}}$  de ce système homogène est effectué. En suite, un facteur de groupe est appliquée au flux de façon que le flux homogénéisé correspond au calcul homogène.
- En supposant une convergence exponentielle vers le flux désiré, la procédure d'accélération d'Aitken est aussi implantée (in Hall, 1980).

Ces techniques ont ensuite été améliorées et/ou remplacées par d'autres (HALSALL M. J., 1990) et de nouvelles techniques d'accélération (voir section 2.3) ont été ajoutées pour obtenir une meilleure performance.

Pour les calculs de supercellule de 3D, le problème de performance est encore plus prononcé, à cause de l'utilisation massive des lignes caractéristiques. Nous avons développé une nouvelle technique, la méthode SCR ("Self-Collision Rebalancing").

pour accélérer le calcul multigroupe. Notre approche sera décrite dans le prochain chapitre.

## CHAPITRE 1

### MÉTHODE DES CARACTÉRISTIQUES

#### 1.1 Discrétisation des variables

Comme dans toutes les méthodes numériques, nous avons besoin de discrétiser les variables. Le cadre de cette thèse se limite à l'équation de transport stationnaire. L'espace  $[0, +\infty[$  pour la variable d'énergie  $E$  est discrétisée en  $G$  intervalles appelés *groupes* et les propriétés nucléaires multigroupe sont générées selon la procédure classique. Pour clarifier les présentations, nous allons omettre l'indice du groupe  $g$  dans cette section en considérant un problème mono-énergétique.

Supposons que le domaine  $D$  soit fini, divisé en régions homogènes et que chaque région ait un volume  $V_j$ , le flux scalaire moyen  $\Phi_j$  de la région  $j$  est défini par:

$$V_j \Phi_j = \frac{1}{4\pi} \int_{V_j} d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}) \quad (1.1)$$

Pour une direction  $\hat{\Omega}$  donnée, comme illustré dans la figure 1.1, soit  $\pi_{\hat{\Omega}}$  un plan perpendiculaire de direction  $\hat{\Omega}$ ,  $\vec{p}$  un point quelconque sur le plan  $\pi_{\hat{\Omega}}$ , et  $\vec{T} = \vec{T}(\hat{\Omega}, \vec{p})$  une ligne infinie dans la direction  $\hat{\Omega}$  en passant par le point  $\vec{p}$ , l'intégration de l'équation ci-dessus peut devenir:

$$V_j \Phi_j = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d^2\Omega \int_{\pi_{\hat{\Omega}}} d^2p \int_{-\infty}^{+\infty} dt \chi_j(\vec{T}, t) \phi(\vec{p} + t\hat{\Omega}, \hat{\Omega}) \quad (1.2)$$

où  $t$  mesure la distance relative sur  $\vec{T}$  par rapport au point  $\vec{p}$ ,  $\chi_j$  est une fonction

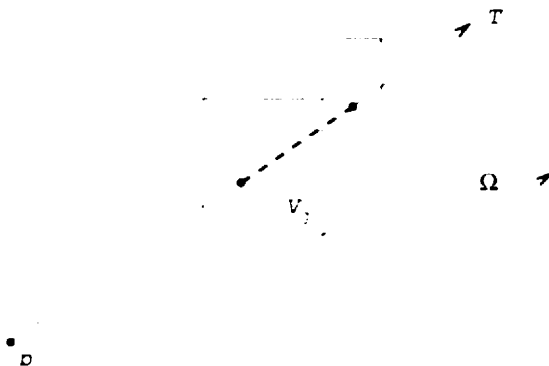


Figure 1.1 Une ligne caractéristique.

caractéristique qui vaut 1 si la ligne  $\vec{T}$  rencontre la région  $V_j$  et vaut zéro sinon. Bien que l'intégration du flux sur  $\vec{T}$  se présente de  $-\infty$  à  $\infty$ , mais résultant de l'application de la fonction  $\chi_j$ , seulement un nombre limité de segments (un seul segment si la région  $V_j$  est convexe) seront utilisés dans l'intégration (1.2). La classe de la méthode des caractéristiques proposée ici est de type "caractéristiques longues" (long characteristics) et ses principales caractéristiques sont les suivants:

Il y a une discrétisation numérique sur la sphère unitaire et à chaque direction discrétisée est associé un plan perpendiculaire. Ce dernier est aussi discrétisé en élément planaire et une ligne caractéristique par élément planaire est tracée, suivant cette direction discrétisée, pour traverser tout le domaine  $D$ .

L'intégration analytique (0.8) est appliquée sur chacune des lignes caractéristiques à tour de rôle.

Nous allons maintenant montrer les quadratures angulaires et planaires que nous avons choisies pour approcher l'intégration (1.2).

## Quadrature angulaire

Dans le cadre du calcul neutronique, la variable angulaire est souvent traitée en utilisant soit les harmoniques sphériques, soit une quadrature angulaire. La méthode des caractéristiques utilise l'approche de la quadrature angulaire.

Soit  $B_M$ , une partition de la sphère unitaire (dénotée  $4\pi$ ) à  $M$  portions:

$$B_M = \left\{ (\hat{\Omega}_i, w_i) \mid i = 1, \dots, M \right\} \quad (1.3)$$

Chaque portion de la partition  $(\hat{\Omega}_i, w_i)$  est caractérisée par une direction  $\hat{\Omega}_i \in B$  associée à son poids  $w_i > 0$ . Les poids des directions doivent vérifier la relation de normalisation:

$$\sum_{i=1}^M w_i = 4\pi. \quad (1.4)$$

De façon générale, une quadrature angulaire est une approximation numérique de l'intégration angulaire sur la sphère unitaire en utilisant une certaine partition, c'est-à-dire que pour une fonction  $f(\hat{\Omega})$  d'angle solide, nous pouvons évaluer l'intégration de  $f(\hat{\Omega})$  sur la sphère  $4\pi$  en utilisant:

$$\int_{4\pi} d^2\Omega f(\hat{\Omega}) \cong \sum_{i=1}^M w_i f(\hat{\Omega}_i). \quad (1.5)$$

Différents types de quadrature angulaire diffèrent selon le choix des directions et des poids qui leur sont associés. Le module EXCELL du code DRAGON adopte la quadrature  $EQ_N$  où un poids uniforme est associé à chacune direction (CARLSON B. G., 1971). Les directions dans  $EQ_N$  sont choisies de façon axialement invariante. Ceci veut dire que, si  $\hat{\Omega} = (\mu, \eta, \xi)$  est une direction choisie, où  $\mu$ ,  $\eta$  et  $\xi$

sont respectivement les cosinus directeurs par rapport à chacun des axes, alors les directions suivantes:

$$\begin{aligned} &(\pm\mu, \pm\eta, \pm\xi), \quad (\pm\eta, \pm\xi, \pm\mu), \quad (\pm\xi, \pm\mu, \pm\eta), \\ &(\pm\eta, \pm\mu, \pm\xi), \quad (\pm\mu, \pm\xi, \pm\eta), \quad (\pm\xi, \pm\eta, \pm\mu) \end{aligned} \quad (1.6)$$

appartiennent aussi à la quadrature angulaire. Ainsi nous obtenons une symétrie complète qui offre plusieurs avantages. Premièrement, pour les calculs des cellules rectangulaires, les résultats obtenus ne sont pas affectés par l'orientation axiale des cellules; deuxièmement, pour une quadrature angulaire, il est souvent exigé que les valeurs théoriques des expressions des moments angulaires:

$$\sum_{i=1}^M w_i \mu_i^m = \sum_{i=1}^M w_i \eta_i^m = \sum_{i=1}^M w_i \xi_i^m = \begin{cases} 0 & \text{si } m \text{ est impair,} \\ \frac{4\pi}{m+1} & \text{si } m \text{ est pair.} \end{cases} \quad (1.7)$$

soient satisfaites à un ordre aussi élevé que possible. La symétrie garantit déjà la satisfaction des conditions ci-dessus pour tous les moments impairs (i.e. tous les  $m$  impairs).

La propriété de symétrie complète est une contrainte forte sur le choix des angles. En relâchant cette propriété, le degré de liberté de la quadrature sera augmenté. Ceci pourrait être approprié dans le cas des géométries particulières (O'DELL R. D. and ALCOUFFE R. E., 1987).

Compte tenu de la remarque de symétrie, nous n'utilisons pour décrire les directions de la quadrature que l'octant principal de la sphère unitaire où les cosinus directeurs sont tous positifs. D'abord, les directions dans un autre octant peuvent être déduites en changeant tout simplement les signes des cosinus directeurs  $\mu$ ,  $\eta$  et  $\xi$ . L'indice  $N$  de la quadrature  $EQ_N$  marque le degré de la quadrature et est toujours pair. L'ensemble  $EQ_N$  se compose de  $N(N+2)/8$  directions  $\hat{\Omega}_j$ , dans

l'octant principal, auxquelles les poids suivants sont associés:

$$w_j = \frac{4\pi}{N(N+2)} \quad j = 1, 2, \dots, N(N+2)/8. \quad (1.8)$$

Chacun des poids correspondant à une portion égale de la sphère unitaire. Grâce à la propriété de symétrie (1.7), il n'y a que  $N/2$  valeurs indépendantes pour les trois types de cosinus directeurs  $\mu$ ,  $\eta$  et  $\xi$ .

Pour illustrer la technique  $EQ_N$ , nous montrons ici des développements pour  $N = 2$  et  $N = 4$ . Pour  $N = 2$ , nous n'avons qu'une seule direction dans chaque octant. L'ensemble des huit directions de  $EQ_2$ :

$$\left\{ \left( \pm \frac{\sqrt{3}}{3}, \pm \frac{\sqrt{3}}{3}, \pm \frac{\sqrt{3}}{3} \right) \right\} \quad (1.9)$$

satisfait la condition du moment (1.7) pour  $m = 2$ . Pour  $N = 4$ , nous avons seulement deux valeurs indépendantes, soient  $\mu_1$  et  $\mu_2$ , pour les trois directions dans l'octant principal. Nous cherchons à satisfaire les conditions des moments jusqu'à l'ordre  $m = 4$ . En tenant compte la condition de symétrie, l'application de l'équation (1.7) dans l'octant principal nous conduit aux équations suivantes:

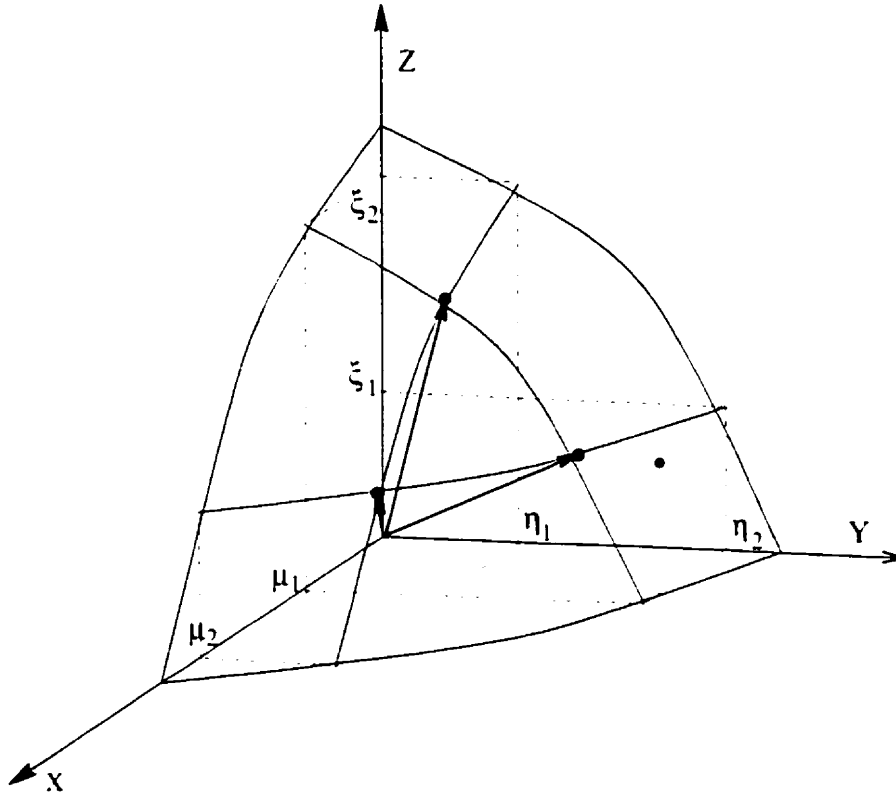
$$2\mu_1^2 + \mu_2^2 = 1 \quad (1.10)$$

$$2\mu_1^4 + \mu_2^4 = 3/5. \quad (1.11)$$

En résolvant l'équation ci-dessus, nous obtenons, pour la quadrature  $EQ_4$ , l'ensemble des 24 directions suivantes:

$$\left\{ (\pm\mu_1, \pm\mu_1, \pm\mu_2), (\pm\mu_1, \pm\mu_2, \pm\mu_1), (\pm\mu_2, \pm\mu_1, \pm\mu_1) \right\} \quad (1.12)$$

où  $\mu_1 = 0.3500212 \dots$  et  $\mu_2 = 0.8688903 \dots$ . La Fig. 1.1 donne un aperçu gra-

Figure 1.2 Quadrature  $EQ_1$ .

phique de  $EQ_1$ .

Pour des valeurs supérieures de  $N$ , il faut appliquer la relation Eq. (1.7) à des ordres supérieurs. Des tables des différentes valeurs des cosinus directeurs pour  $N = 6, 8, 10, 12, 14, 16$  peuvent être trouvées dans la référence (CARLSON B. G., 1971).

### Génération de lignes d'intégration

Soit  $\hat{\Omega} = (\mu, \eta, \xi)$  une direction choisie parmi les valeurs de la quadrature angulaire utilisée, l'ensemble de la quadrature planaire à la direction  $\hat{\Omega}$  est un ensemble



de lignes équidistantes et parallèles à  $\vec{\Omega}$ . Ces lignes sont aussi connues sous les noms suivants: des "caractéristiques", des lignes d'intégration, etc. Pour générer la quadrature planaire à la direction  $\vec{\Omega}$ , nous avons besoin d'une base orthonormée  $B$

$$B = \{(\mu_1, \eta_1, \xi_1), (\mu_2, \eta_2, \xi_2), (\mu_3, \eta_3, \xi_3)\} \quad (1.13)$$

de  $R^3$  telle que:

$$\mu_i \mu_j + \eta_i \eta_j + \xi_i \xi_j = \begin{cases} 1, & \text{si } i = j \\ 0, & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (1.14)$$

pour  $i, j = 1, 2, 3$  et

$$\mu_1 = \mu, \quad \eta_1 = \eta, \quad \xi_1 = \xi. \quad (1.15)$$

Il est clair que les vecteurs  $(\mu_i, \eta_i, \xi_i)$ , pour  $i = 2, 3$ , sont des vecteurs directeurs du plan perpendiculaire.

Remarquons que l'équation (1.15) implique la condition de normalisation suivante:

$$\mu_1^2 + \eta_1^2 + \xi_1^2 = 1. \quad (1.16)$$

il n'y a donc que huit équations indépendantes dans (1.14)-(1.15) pour neuf inconnues. Ainsi nous pouvons introduire une condition supplémentaire afin de résoudre les équations de base. Fixant à zéro une des composantes du deuxième vecteur de la base est une choix possible. N'ayant aucune raison de privilégier un axe plutôt

qu'un autre, trois bases sont ainsi constituées, une selon chaque axe:

$$\begin{aligned} B_x &= \left\{ (\mu, \eta, \xi), \left( 0, \frac{\xi}{\sqrt{1-\eta^2}}, \frac{-\eta}{\sqrt{1-\mu^2}} \right), \left( -\sqrt{1-\mu^2}, \frac{\mu\eta}{\sqrt{1-\mu^2}}, \frac{\xi\mu}{\sqrt{1-\mu^2}} \right) \right\} \\ B_y &= \left\{ (\mu, \eta, \xi), \left( \frac{-\xi}{\sqrt{1-\eta^2}}, 0, \frac{\mu}{\sqrt{1-\eta^2}} \right), \left( \frac{\mu\eta}{\sqrt{1-\eta^2}}, -\sqrt{1-\eta^2}, \frac{\xi\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} \right) \right\} \\ B_z &= \left\{ (\mu, \eta, \xi), \left( \frac{\eta}{\sqrt{1-\xi^2}}, \frac{-\mu}{\sqrt{1-\xi^2}}, 0 \right), \left( \frac{\mu\xi}{\sqrt{1-\xi^2}}, \frac{\eta\xi}{\sqrt{1-\xi^2}}, -\sqrt{1-\xi^2} \right) \right\} \end{aligned}$$

Chacune des bases  $B_x$ ,  $B_y$  et  $B_z$  (voir figure 1.1) est utilisée à tour de rôle dans le processus de calcul des lignes d'intégration. Cette utilisation répétitive des trois bases, qui n'existe pas dans le cas de 2D, augmente artificiellement le nombre de lignes d'un facteur trois. Nous avons choisi d'utiliser un maillage carré, dont les côtés sont perpendiculaires aux vecteurs directeurs, pour diviser le plan perpendiculaire. Les lignes d'intégration dans la direction  $\hat{\Omega}$  sont alors les droites passant par le centre des mailles ainsi définies. À chaque ligne est associée comme poids l'aire de la maille correspondante.

Soit  $\vec{p}$  le centre d'une maille du plan perpendiculaire de la direction  $\hat{\Omega}$ , nous rappelons que  $\vec{T}(\vec{p}, \hat{\Omega})$  dénote la ligne d'intégration qui correspond à cette maille. Comme  $D$  est un domaine fini composé de plusieurs régions, la ligne  $\vec{T}$  pourra rencontrer différentes régions quand elle traverse le domaine. Supposons que  $\vec{T}$  rencontre  $K$  différentes régions dont les points d'intersection sont notés par  $\vec{r}_0, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_K$  en ordre croissant suivant la direction  $\hat{\Omega}$ .<sup>1</sup> Ainsi nous obtenons  $K$  segments,  $[\vec{r}_{k-1}, \vec{r}_k]$  avec  $k = 1, \dots, K$ , sur la ligne  $\vec{T}$ . Nous remarquons que la numérotation des segments est toujours faite par rapport à une certaine ligne. Pour ne pas allourdir la notation, nous ne décrirons pas cette dépendance explicitement dans les formules.

<sup>1</sup>Plus précisément, il y a  $K$  fois de changement de région suivant la ligne, car une ligne peut rencontrer plusieurs fois la même région si cette dernière n'est pas convexe.

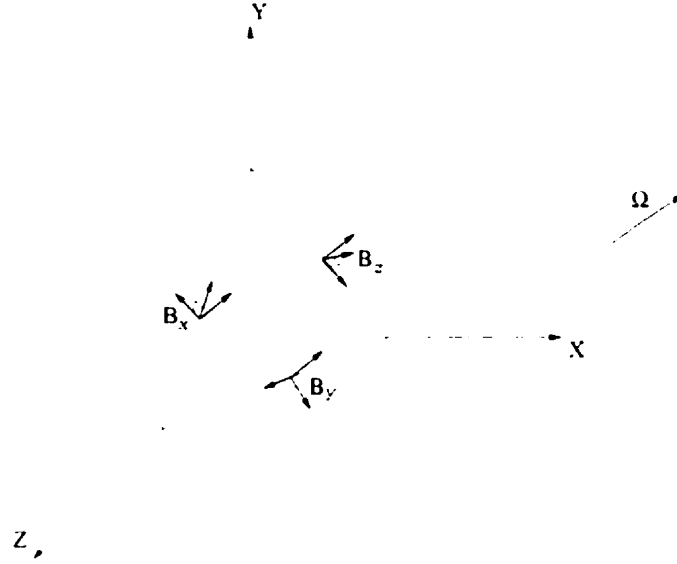


Figure 1.3 Trois bases pour la quadrature planaire.

Pour chaque segment  $k$ , nous allons noter par  $L_k$  la longueur du segment:

$$L_k = (\vec{r}_k - \vec{r}_{k-1}) \cdot \hat{\Omega}, \quad k = 1, 2, \dots, K \quad (1.17)$$

et par  $N_k$  le numéro de la région où se trouve le segment  $k$ .

Pour la direction opposée  $\hat{\Omega}' = -\hat{\Omega}$ , les mêmes lignes d'intégration sont utilisées mais dans le sens inverse, i.e.:

$$\vec{r}_k = \vec{r}_{K-k}, \quad k = 0, 1, \dots, K \quad (1.18)$$

$$L'_k = L_{K+1-k}, \quad k = 1, 2, \dots, K. \quad (1.19)$$

Cette manoeuvre non seulement coupe à moitié l'effort de tracking mais aussi est utile pour la conservation des neutrons (voir section 1.3).

### Normalisation des lignes d'intégration

Pour une portion  $(\hat{\Omega}_i, \omega_i)$  choisie dans la quadrature  $EQ_N$ , soit  $\vec{T}_{i,n}$  une ligne d'intégration dans la direction  $\hat{\Omega}_i$ , qui passe par le centre  $\vec{p}_{i,n}$  de la maille  $n$  du plan perpendiculaire  $\pi_{\hat{\Omega}_i}$ , nous notons par  $p_{i,n}$  le poids associé de  $\vec{T}_{i,n}$ .<sup>2</sup> Sans l'écrire explicitement, nous rappelons que  $k$ , le numéro de segment, dépend de la ligne  $\vec{T}_{i,n}$  tout comme la longueur du segment  $L_k$  et le numéro de la région  $N_k$ . Pour une région  $j$  dans le domaine  $D$ , nous pouvons estimer son volume soit dans une direction donnée par:

$$V'_j(\hat{\Omega}_i) = \sum_n p_{i,n} \sum_k \delta_{j,N_k} L_k \quad (1.20)$$

soit pour tous les angles par:

$$V'_j = \frac{1}{4\pi} \sum_i \omega_i V'_j(\hat{\Omega}_i) \quad (1.21)$$

où  $\delta$  est la symbole Kronecker, et l'indice  $k$  court sur tous les entiers possibles.

Comme illustré dans la Figure 1.4, le volume directionnel  $V'_j(\hat{\Omega}_i)$  dépend de l'angle choisi et donc diffère généralement du vrai volume  $V_j$ . Ainsi le volume estimé  $V'_j$  diffère en conséquence du vrai volume  $V_j$ . Dans les codes déterministes, la longueur de segments est habituellement renormalisée afin de conserver le volume de la région. Pour ce faire, nous avons le choix entre utiliser des facteurs directionnels:

$$L'_k = L_k \frac{V_j}{V'_j(\hat{\Omega}_i)}. \quad (1.22)$$

---

<sup>2</sup>Nous utilisons des lignes équidistantes dans notre code, le poids  $p_{i,n}$  des lignes est ainsi devenu une constante qui, d'ailleurs, peut s'avérer imposée quand l'utilisateur du code force la densité des lignes à une certaine valeur maximale.

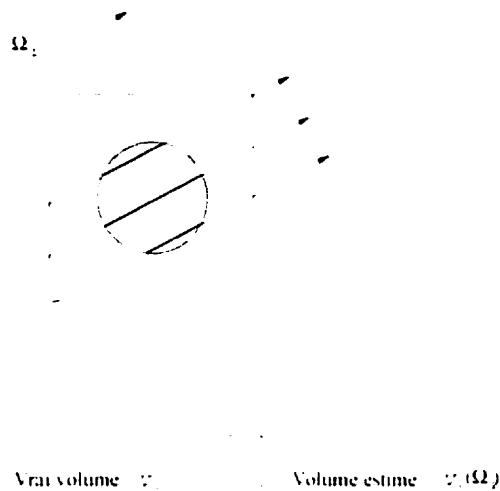


Figure 1.4 Volume estimé  $V_j'(\Omega_i)$  pour la direction  $\Omega_i$ .

et utiliser des facteurs globaux:

$$L_k'' = L_k \frac{V_j}{V_j'}. \quad (1.23)$$

Pour illustrer la différence de ces deux normalisations, nous avons besoins d'introduire davantage de notations.

Le code CACTUS a adopté la dernière alternative afin d'éviter le problème de division par zéro si la région  $j$  n'est pas traversée par les lignes de tous les angles. Nous avons choisi la première alternative parce qu'elle respecte mieux la loi de conservation des neutrons (voir section 1.3).

Bien que les volumes des régions peuvent être conservé facilement en modifiant la longueur des segments, l'intégration sur surfaces est toujours effectué avec une certaine incertitude. Soit  $\{S_\alpha\}$  une partition de la surface  $\partial D$ , comme illustré dans

la figure 1.5, nous avons:

$$d^2 p = |\dot{\Omega}_i \cdot \dot{N}_\alpha| d^2 r_b \quad (1.24)$$

où  $\dot{N}_\alpha$  est la normale extérieur de la surface  $S_\alpha$ . En utilisant le changement de variable ci-dessus, nous pouvons calculer l'aire de la surface  $S_\alpha$  par:

$$\begin{aligned} S_\alpha &= \int_{S_\alpha} d^2 r_b \\ &= \int_{\pi_{\dot{\Omega}_i}} \frac{1}{|\dot{\Omega}_i \cdot \dot{N}|} d^2 p \\ &\approx \frac{1}{|\dot{\Omega}_i \cdot \dot{N}|} \sum_n \chi_\alpha(\vec{r}_K) p_{i,n} \\ &= S'_\alpha(\dot{\Omega}_i) \end{aligned} \quad (1.25)$$

où  $\vec{r}_K$  est le dernier point d'intersection entre la ligne  $\vec{T}_{i,n}$  et le domaine  $D$ , et  $\chi_\alpha$  est la fonction définie par:

$$\chi_\alpha(\vec{r}) = \begin{cases} 1. & \text{si } \vec{r} \in S_\alpha \\ 0. & \text{sinon.} \end{cases} \quad (1.26)$$

Il est clair que l'utilisation de la quadrature planaire conduit à une évaluation de l'aire qui est à la fois erronée et dépendante de la direction. Pour contourner la dépendance de direction, nous utilisons la valeur moyenne  $S'_\alpha$ . Considérons l'approximation suivante:

$$|\dot{\Omega}_i \cdot \dot{N}| S_\alpha \approx \sum_n \chi_\alpha(\vec{r}_K) p_{i,n}. \quad (1.27)$$

Dans l'équation ci-dessus, nous appliquons la quadrature angulaire sur le côté

gauche et l'intégration exacte sur le côté droite. En utilisant l'égalité suivante:

$$\int_{4\pi} |\dot{\Omega}_i \cdot \dot{N}| d^2\Omega = \pi. \quad (1.28)$$

nous obtenons la surface calculée  $S'_\alpha$  en faisant la moyenne sur des valeurs  $S'(\dot{\Omega}_i)$  comme suit:

$$S_\alpha \approx \frac{1}{\pi} \sum_i \omega_i \sum_n \chi_\alpha(\vec{r}_K) p_{i,n} = S'_\alpha. \quad (1.29)$$

Remarquons que, en utilisant les mêmes lignes d'intégration dans la direction inverse, nous avons aussi:

$$S'_\alpha = \frac{1}{\pi} \sum_i \omega_i \sum_n \chi_\alpha(\vec{r}_0) p_{i,n}. \quad (1.30)$$

Cependant, ce problème de mauvaise évaluation de surfaces n'existe pas quand les lignes caractéristiques sont cycliques, car l'évaluation des courants entrant et sortant du domaine, qui consistent des intégrations sur des surfaces externes, est explicitement éliminée. Or, l'utilisation des lignes cycliques n'est pas encore exploitée dans le cadre de géométrie de trois dimensions.

Nous remarquons que l'évaluation des surfaces fait intervenir seulement les poids des lignes. Une normalisation des lignes dans le but de conserver la vraie aire des surfaces affecte nécessairement le poids de chaque ligne. Bien que la modification des longueurs de segments, utilisé pour conserver le vrai volume des régions, n'affecte pas les calculs sur des surfaces, la modification du poids d'une ligne d'intégration affecte nécessairement l'évaluation de tous les volumes et de toutes les surfaces que rencontre cette ligne. En plus, comme nous avons mentionné, une ligne utilisée pour une direction est aussi utilisée pour la direction opposée dans le sens inverse. Ainsi l'ensemble des lignes qui rencontrent une surface  $S_\alpha$  dans une

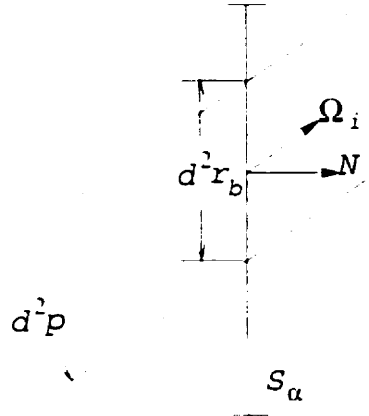


Figure 1.5 Élément d'intégration de surface.

direction peut rencontrer plusieurs surfaces dans la direction opposée. Comme il n'y a aucune raison d'associer deux poids différents à la même ligne, le problème de normalisation dans l'objectif de conserver la vraie aire des surfaces externes n'est donc pas trivial. Pour contourner cette difficulté, nous allons utiliser la surface calculé  $S'_\alpha$  au lieu de la vraie surface  $S_\alpha$ . En ce faisant, nous allons voir dans la section 1.4 que la loi de conservation des neutrons est respectée pour le domaine entier.

## 1.2 Résolution sur une ligne d'intégration

Soit  $\vec{T}$  une ligne d'intégration, soient  $\vec{r}_0, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_K$  les points d'intersection tels que définis dans la section précédente, supposons que la source  $Q_j$  soit homogène dans chaque région  $V_j$  du domaine  $D$  et que le flux entrant:

$$\phi(\vec{r} + 0, \vec{\Omega}) = \phi_0 \quad (1.31)$$



soit connu. Nous définissons en plus:

$$q_k = Q_{N_k}, \quad \sigma_k = \Sigma_{N_k}. \quad (1.32)$$

En appliquant la formule (0.8), nous obtenons facilement le flux angulaire sur tous les points d'intersection:

$$\phi_k = \phi_{k-1} e^{-\tau_k} + \frac{q_k}{\sigma_k} (1 - e^{-\tau_k}). \quad (1.33)$$

le flux moyen sur tous les segments:

$$\bar{\phi}_k = \left( \phi_{k-1} - \frac{q_k}{\sigma_k} \right) \frac{1 - e^{-\tau_k}}{\tau_k} + \frac{q_k}{\sigma_k} \quad (1.34)$$

et la différence des flux sortant et flux entrant:

$$\Delta \phi_k = \phi_k - \phi_{k-1} = \left( \frac{q_k}{\sigma_k} - \phi_{k-1} \right) (1 - e^{-\tau_k}) \quad (1.35)$$

pour  $1 \leq k \leq K$ . Dans les équations ci-dessus,  $\tau_k$  désigne la distance entre  $\vec{r}_{k-1}$  et  $\vec{r}_k$  mesurée en libre parcours moyen (voir équation (0.5)):

$$\tau_k = \tau(\vec{r}_{k-1}, \vec{r}_k) = \Sigma_{N_k} L_k. \quad (1.36)$$

Remarquons que les solutions (1.33) et (1.34) sont valides uniquement quand  $\sigma_k \neq 0$ . Alors pour des régions vides où  $\sigma_k$  s'annule, la source  $q_k$  s'annule aussi. Dans ce dernier cas, nous obtenons les solutions triviales suivantes:

$$\phi_k = \phi_{k-1} \quad (1.37)$$

$$\bar{\phi}_k = \phi_{k-1}. \quad (1.38)$$

Ainsi, si l'on connaît le flux entrant  $\phi_0$ , un calcul d'équation différentielle ordinaire segment-par-segment pourra nous donner le flux angulaire dans la direction  $\hat{\Omega}$  tout au long de la ligne  $\vec{T}$ .

Dans le cas d'une ligne cyclique, la procédure est un peu différente. Soit  $\vec{T}$  une ligne cyclique avec une période

$$S = \sum_{k=1}^K L_k. \quad (1.39)$$

alors nous avons  $\vec{r}_K = \vec{r}_0$  et la condition de périodicité (0.15) devient:

$$\phi_K = \phi_0. \quad (1.40)$$

Dans CACTUS, cette dernière est traitée comme un des critères de convergence (HALSALL M. J., 1980), tandis que dans DRAGON, son traitement est directement intégré dans la procédure de résolution en utilisant la méthode de shooting ("shooting method") (ROY R., 1998a).

### 1.3 Conservation des neutrons et résolution dans un domaine physique

Pour un calcul neutronique, il est important de respecter la conservation des neutrons. Nous allons montrer maintenant comment cette loi peut être respectée dans le cadre d'une méthode de caractéristiques longues. Pour ce faire, dans cette section, nous allons supposer que la normalisation des lignes d'intégration ne soit pas encore faite afin de montrer son importance pour obtenir la conservation des neutrons. Nous supposons en plus que  $\phi_k$  et  $\bar{\phi}_k$  soient disponibles sur tous les segments pour toutes les lignes d'intégration.

### Conservation intégrale des neutrons dans une région

Soit  $\Phi_j$  le flux scalaire moyen dans une région donnée  $j$ , nous nous attendons à ce que le taux d'interaction dans la région  $j$  soit tout simplement la somme de ceux sur tous les segments traversant la région, i.e.:

$$\Sigma_j V_j \Phi_j = \frac{1}{4\pi} \sum_i \omega_i \sum_n p_{i,n} \sum_k \delta_{j,N_k} \tau_k \bar{\phi}_k \quad (1.41)$$

$$= \frac{1}{4\pi} \sum_i \omega_i \sum_n p_{i,n} \sum_k \delta_{j,N_k} \left( \phi_k - \frac{q_k}{\sigma_k} \right) (1 - e^{-\tau_k}) + Q_j V_j' \quad (1.42)$$

où  $\bar{\phi}_k$  est le flux angulaire moyen sur le segment  $k$  et  $V_j'$  est le volume calculé par l'équation (1.21). Sans l'écrire explicitement, nous rappelons que la numérotation des segments dépend toujours de la direction et de la ligne choisies.

La loi de conservation des neutrons se traduit par l'équation suivante:

$$\Phi_{j,out} - \Phi_{j,in} + \Sigma_j V_j \Phi_j = Q_j V_j \quad (1.43)$$

où les  $\Phi_{j,out}$  et  $\Phi_{j,in}$  désignent respectivement les quantités des neutrons entrants et sortants par la frontière de la région  $j$ . En basant sur la connaissance du flux angulaire sur les segments, la différence  $\Phi_{j,out} - \Phi_{j,in}$  peut aussi être facilement calculée comme suit:

$$\Phi_{j,out} - \Phi_{j,in} = \frac{1}{4\pi} \sum_i \omega_i \sum_n p_{i,n} \sum_k \delta_{j,N_k} \Delta \phi_k \quad (1.44)$$

$$= \frac{1}{4\pi} \sum_i \omega_i \sum_n p_{i,n} \sum_k \delta_{j,N_k} \left( \frac{q_k}{\sigma_k} - \phi_{k-1} \right) (1 - e^{-\tau_k}) \quad (1.45)$$

En substituant  $\Phi_{j,out} - \Phi_{j,in}$  par l'équation (1.45) et  $\Sigma_j V_j \Phi_j$  par l'équation (1.42)

dans l'équation (1.43), la loi de conservation des neutrons se réduit à:

$$V'_j = V_j. \quad (1.46)$$

Ainsi, en utilisant les lignes d'intégration normalisées (1.23), la méthode de Askew respecte la loi de conservation (HALSALL M. J., 1980). C'est pourquoi, en général, les lignes d'intégration seront normalisées pour obtenir des volumes exacts.

### Conservation directionnelle des neutrons dans une région

Bien que la loi de conservation soit respectée intégralement pour chaque région en utilisant (1.23), elle n'est pas respectée pour chaque direction.

Soit  $\hat{\Omega}_i$  une direction donnée et  $\Phi_j(\hat{\Omega}_i)$  le flux angulaire moyen dans la région  $j$  dans la direction  $\hat{\Omega}_i$ , de la même façon qu'en (1.42), nous pouvons calculer le taux de collision dans la direction  $\hat{\Omega}_j$  dans la région  $j$  comme suit:

$$\Sigma_j V_j \Phi_j(\hat{\Omega}_i) = \sum_n p_{i,n} \sum_k \delta_{j,N_k} \tau_k \bar{\phi}_k \quad (1.47)$$

$$= \sum_n p_{i,n} \sum_k \delta_{j,N_k} \left( \phi_k - \frac{q_k}{\sigma_k} \right) (1 - e^{-\tau_k}) + Q_j V'_j(\hat{\Omega}_j) \quad (1.48)$$

La loi de conservation des neutrons dans la direction  $\hat{\Omega}_i$  se traduit par l'équation suivante:

$$\Phi_{j,\text{out}}(\hat{\Omega}_i) - \Phi_{j,\text{in}}(\hat{\Omega}_i) + \Sigma_j V_j \Phi_j(\hat{\Omega}_i) = Q_j V_j \quad (1.49)$$

La différence,  $\Phi_{j,\text{out}}(\hat{\Omega}_i) - \Phi_{j,\text{in}}(\hat{\Omega}_i)$ , des neutrons entrants et sortants dans la di-

rection  $\hat{\Omega}_i$  peut aussi être facilement calculée comme suit:

$$\Phi_{j,\text{out}}(\hat{\Omega}_i) - \Phi_{j,\text{in}}(\hat{\Omega}_i) = \sum_n p_{i,n} \sum_k \delta_{j,N_k} \Delta\phi_k \quad (1.50)$$

$$= \sum_n p_{i,n} \sum_k \delta_{j,N_k} \left( \frac{q_k}{\sigma_k} - \phi_{k-1} \right) (1 - e^{-\tau_k}) \quad (1.51)$$

La substitution de (1.48) et (1.51) dans (1.49) conduit aussi à:

$$V'_j(\hat{\Omega}_i) = V_j. \quad (1.52)$$

Ainsi, pour que la loi de conservation des neutrons soit respectée dans chaque direction, il faut utiliser les lignes d'intégration normalisées par (1.22). L'équation (1.43) est respectée en conséquence. Ceci justifie donc notre choix de procédure de normalisation.

En utilisant  $L'_k$  de (1.22) comme longueur du segment  $k$ , nous utilisons dans notre code l'équation (1.48) pour calculer le flux angulaire  $\Phi_j(\hat{\Omega}_i)$  dans chaque direction pour tous les régions. Ensuite, nous calculons le flux scalaire dans chaque région en appliquant la quadrature angulaire sur le flux angulaire:

$$\Phi_j = \frac{1}{4\pi} \sum_i \omega_i \Phi_j(\hat{\Omega}_i) \quad (1.53)$$

#### 1.4 Conservation des neutrons et conditions aux limites

Le courant sortant total  $J_{+, \alpha}$  d'une surface  $S_\alpha \in \partial D$  est défini par:

$$J_{+, \alpha} = \frac{1}{4\pi} \int_{S_\alpha} d^2 \vec{r}_b \int_{\hat{\Omega} \cdot \hat{N}_\alpha > 0} d^2 \Omega \hat{\Omega} \cdot \hat{N}_\alpha \phi(\vec{r}_b, \hat{\Omega}) \quad (1.54)$$

En utilisant le changement de variables (1.24), le calcul du flux sortant consiste à effectuer la sommation suivante:

$$J_{+, \alpha} = \frac{1}{4\pi} \sum_i \omega_i \sum_n p_{i,n} \chi_\alpha(\vec{r}_K) \phi_K. \quad (1.55)$$

Mais pour calculer le flux sur une ligne d'intégration, comme nous avons vu dans la section 1.2, il nous faut connaître le flux entrant sur le point de départ  $\vec{r}_0$  de la ligne en question. Il s'agit donc maintenant de discuter quel type de conditions aux limites seront appliquées. Dans cette thèse, nous traitons spécifiquement, comme conditions aux limites, les réflexions isotropes avec un facteur d'albedo, i.e.:

une portion (quantifiée par un facteur albedo  $\beta_\alpha$  qui peut être différent pour chaque surface  $\alpha$ ) des neutrons sortant par la surface  $\alpha$  est réinjectée dans le domaine par la même surface. Ceci peut être traduit par une relation entre le courant entrant  $J_{-, \alpha}$  et le courant sortant  $J_{+, \alpha}$ :

$$J_{-, \alpha} = \beta_\alpha J_{+, \alpha} \quad (1.56)$$

la réinjection des neutrons par une surface  $\alpha$  est faite de manière isotrope (uniforme en direction), i.e.:

$$\phi_{0, \alpha} = \frac{4}{S'_\alpha} J_{-, \alpha}, \quad (1.57)$$

où  $\phi_{0, \alpha}$  est le flux entrant pour toutes les lignes  $T_{i,n}$  telles que  $\chi_\alpha(\vec{r}_0) = 1$  et  $\hat{\Omega}_i \cdot \hat{N}_\alpha < 0$ .

Dans l'équation (1.57), nous avons utilisé  $S'_\alpha$  au lieu de  $S_\alpha$  afin de respecter la loi de conservation des neutrons dans le domaine entier. En fait, en additionnant l'équation (1.43) sur toutes les régions, nous obtenons l'équation de la loi de

conservation dans le domaine entier:

$$\sum_J \Phi_{J,\text{out}} - \sum_J \Phi_{J,\text{in}} + \sum_J \Sigma_J V_J \Phi_J = \sum_J Q_J V_J. \quad (1.58)$$

Comme un neutron sortant d'une région par une surface interne (ou interface) entre nécessairement dans une autre région, les termes du flux entrant et sortant peuvent être simplifiés comme suit:

$$\sum_J \Phi_{J,\text{out}} - \sum_J \Phi_{J,\text{in}} = \sum_\alpha J_{+,\alpha} - \sum_\alpha J_{-,\alpha}. \quad (1.59)$$

si nous pouvons retrouver le courant entrant d'une surface en collectionnant le flux entrant sur la surface en question, i.e.:

$$\begin{aligned} J_{-,\alpha} &= \frac{1}{4\pi} \sum_i \omega_i \sum_n p_{i,n} \chi_\alpha(\vec{r}_0) \phi_0 \\ &= \frac{1}{4\pi} \sum_i \omega_i \sum_n p_{i,n} \chi_\alpha(\vec{r}_0) \times \phi_{0,\alpha} \\ &= \frac{S'_\alpha}{4} \times \phi_{0,\alpha}. \end{aligned} \quad (1.60)$$

Ainsi, pour une condition de réflexion complète ( $\beta_\alpha = 1$ ), la conservation (intégrale ou directionnelle) des neutrons dans une région conduit à la conservation des neutrons dans le domaine entier à condition d'avoir utilisé la surface  $S'_\alpha$  dans l'équation (1.57). Par contre, la distribution des neutrons peut être affectée due à la réflexion isotrope sur la surface externe du domaine.

## 1.5 Solution multigroupe

Nous allons maintenant traiter des problèmes multigroupes comme suit:

$$\hat{\Omega} \cdot \nabla \phi^g(\vec{r}, \hat{\Omega}) + \Sigma^g(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \sum_{g'} \Sigma_s^{gg'}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}) + \chi^g(\vec{r}) F(\vec{r}) \quad (1.61)$$

où  $F(\vec{r})$  est le taux de production effective des neutrons de fission:

$$F(\vec{r}) = \frac{1}{K_{\text{eff}}} \sum_{g'} \nu \Sigma_f^{g'}(\vec{r}) \phi^{g'}(\vec{r}) \quad (1.62)$$

Nous avons introduit les symboles suivants:

$\Sigma_s$  : section efficace de diffusion (transfert entre les groupes);

$\Sigma_f$  : section efficace de fission;

$\nu$  : nombre moyen des neutrons secondaires issus de la fission;

$\chi$  : spectre des neutrons;

$K_{\text{eff}}$  : facteur de multiplication effectif;

-  $g$  : indice du groupe d'énergie.

Sachant que les variables angulaires et spatiales sont discrétisées selon les procédures décrites dans la section 1.1, dans cette section, nous allons utiliser la forme continue pour décrire deux types de calcul multigroupe et nous retournerons à la forme discontinue pour décrire l'accélération de balancement.

Pour un groupe d'énergie  $g$  donné, l'équation (1.62) se comporte comme une équation mono-énergétique qui peut se résoudre de façon itérative en utilisant la technique développée dans les sections précédentes. Il s'agit de la boucle interne dans la résolution des problèmes multigroupes.



Comme la source pour un groupe donné dépend de la valeur du flux des autres groupes, une boucle externe est nécessaire pour calculer le flux multigroupe. La source de fission est calculée dans la boucle externe en se basant sur le flux obtenu dans l'itération externe précédente. Une itération externe peut correspondre à plusieurs itérations internes et, pour chacune d'elles, la source de fission est identique.

Dans le code DRAGON, deux types de calcul pour des problèmes à valeur propre d'une source de fission sont supportés:

- TYPE K: Calculer la valeur  $K_{\text{eff}}$  avec une fuite fixe;
- TYPE B: Calculer le laplacien géométrique critique avec  $K_{\text{eff}}$  fixe.

### TYPE K

Supposons que, après avoir effectué un calcul développé dans les sections précédentes, le flux soit connu dans toutes les régions pour tous les groupes d'énergie. Si la réflexion est totale pour toutes les surfaces, i.e.:

$$\beta_\alpha = 1.0 \quad \forall S_\alpha \in \partial D. \quad (1.63)$$

alors, en intégrant tout simplement les équations (1.61)-(1.62), nous évaluons le  $K_{\text{eff}}$  comme le rapport de la production et de la consommation des neutrons comme suit:

$$K_{\text{eff}} = \frac{\int_D d^3r \left( \sum_g \chi^g \right) \left( \sum_g \nu \Sigma_f^g \Phi^g \right)}{\int_D d^3r \sum_g \sum_{g'} (\Sigma^g \delta_{gg'} - \Sigma_s^{gg'}) \Phi^{g'}} \quad (1.64)$$

Dans le cas où la réflexion n'est pas totale partout, nous utilisons une autre procédure. Comme le niveau du flux est arbitraire pour un calcul critique, nous

normalisons le flux de façon que la production effective des neutrons de fission dans le domaine entier soit l'unité. Par conséquence, nous évaluons  $K_{\text{eff}}$  comme suit:

$$K_{\text{eff}} = \int_D d^3r \left( \sum_g \chi^g \right) \left( \sum_g \nu \Sigma_f^g \Phi^g \right) \quad (1.65)$$

Remarquons que, pour un calcul avec un laplacien géométrique imposé, la section efficace de diffusion  $\Sigma_s^{gg}$  dans les deux équations précédentes sera remplacée par  $\Sigma_s^{gg} - d^g B^2$  avec le coefficient de diffusion  $d^g$  et le laplacien géométrique du système  $B^2$ .

## TYPE B

Un modèle homogène pour traiter le laplacien géométrique consiste à représenter les taux de fuites axiales et radiales par une section efficace artificielle  $d^g B^2$  uniformément distribuée dans le domaine entier. Pour ce faire, le flux scalaire est d'abord homogénéisé sur tout le domaine selon une procédure classique tout en conservant le taux de réaction (LEWIS E. E. and MILLER W. F., Jr., 1984). Comme la stratégie habituelle employée pour obtenir les taux de réaction consistants pour des modèles de diffusion doit exécuter une recherche de laplacien géométrique critique, le laplacien  $B^2$  est ensuite cherché automatiquement afin de satisfaire une valeur imposée de  $K_{\text{eff}}$  qui est souvent l'unité (STAMMLER R. J. J. and ABBATE M. J., 1983) et le coefficient de diffusion  $d^g$  est calculé en conséquence (KAVENOKY A. and MICHEL-VILLAZ M., 1968).

Dans DRAGON, deux modèles homogènes sont disponibles:  $B_0$  et  $B_1$ . Ces modèles ont été développés dans le but de ne pas avoir à recalculer les probabilités de première collision qui dépendent des sections efficaces totales et sont coûteuses à construire. Pour chacun des deux, il y a plusieurs façons d'introduire les taux de

fuite  $d^g B^2$  dans le calcul dont les deux plus importantes concernent les options SIGS et PNL.

- Calcul SIGS (HÉBERT A., 1993): Les taux de fuite sont soustraits directement du côté gauche de l'équation du transport. Ainsi l'équation (1.61) devient:

$$\begin{aligned} \hat{\Omega} \cdot \nabla \phi^g(\vec{r}, \hat{\Omega}) + \Sigma^g(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}, \hat{\Omega}) \\ = \sum_{g'} \left( \Sigma_{\vec{r}}^{gg'}(\vec{r}) - \delta_{gg'} d^g B^2 \right) \Phi^{g'}(\vec{r}) + \chi^g(\vec{r}) F(\vec{r}) \end{aligned} \quad (1.66)$$

Calcul PNL: Les taux de fuite peuvent être introduit d'une autre façon en utilisant des probabilités de non-fuite  $P_{\text{NL}}^g$  ("Probability Non-Leakage"). Les  $P_{\text{NL}}^g$  sont calculées à partir du flux scalaire et les taux de fuite:

$$P_{\text{NL}}^g = \frac{\int_D d^3 r \Sigma^g(\vec{r}) \Phi^g(\vec{r})}{\int_D d^3 r \Sigma^g(\vec{r}) \Phi^g(\vec{r}) + d^g B^2 \int_D d^3 r \Phi^g(\vec{r})} \quad (1.67)$$

et sont ensuite appliqués sur la source du côté droit de l'équation (1.61) comme suit:

$$\begin{aligned} \hat{\Omega} \cdot \nabla \phi^g(\vec{r}, \hat{\Omega}) + \Sigma^g(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}, \hat{\Omega}) \\ = \left( \sum_{g'} \Sigma_{\vec{r}}^{gg'}(\vec{r}) \Phi^{g'}(\vec{r}) + \chi^g(\vec{r}) F(\vec{r}) \right) P_{\text{NL}}^g \end{aligned} \quad (1.68)$$

### Accélération par balancement

En intégrant l'équation (1.61) sur tout le domaine et toute la sphère unitaire, nous obtenons:

$$\sum_{\alpha} (J_{\text{out},\alpha}^g - J_{\text{in},\alpha}^g) + \sum_j \left( \Sigma_j^g V_j \Phi_j^g - \sum_{g'} \Sigma_{s,j}^{gg'} V_j \Phi_j^{g'} \right) = \sum_j \lambda_j^g F_j V_j \quad (1.69)$$

où  $F_j$  est le taux de production effective des neutrons de fission dans la région  $j$ .

Durant la procédure d'itération, il est loin d'être certain que le vecteur flux-courant  $(\Phi_j^g, J_{\text{in},\alpha}^g, J_{\text{out},\alpha}^g)$  satisfasse l'équation ci-dessus, et ceci est vrai même dans les domaines complètement réfléchis (albedo de 1 partout à la frontière). Cette incertitude provient de la dépendance des remontées de neutrons ("up-scattering") dans les sources des groupes thermiques. Pour forcer l'équation (1.69), la méthode de balancement ("fundamental mode rebalancing") est appliquée à la fin de chaque itération interne. La dépendance des neutrons remontés est variable pour les sources des groupes thermiques. Elle est plus faible pour les groupes de haute énergie, plus forte pour les groupes de faible énergie et devient dominante pour les groupes où l'énergie du groupe descend suffisamment bas dans l'échelle. Ainsi la méthode de balancement consiste à définir, pour tous les groupes non convergés, des facteurs de normalisation  $\gamma^g$  afin de forcer l'équation (1.69) avec le vecteur flux-courant balancé défini comme suit:

$$\Phi_i^g = \gamma^g \Phi_i^g, \quad J_{\text{in},\alpha}^g = \gamma^g J_{\text{in},\alpha}^g, \quad J_{\text{out},\alpha}^g = \gamma^g J_{\text{out},\alpha}^g. \quad (1.70)$$

Soit  $G_u$  l'ensemble des groupes non convergés. Pour un groupe  $g \in G_u$ , en substituant les flux et courant balancés ainsi définis dans (1.69), nous obtenons un

système des facteurs  $\gamma^g$ :

$$\begin{aligned} & \left( \sum_{\alpha} J_{\text{out},\alpha}^g (1 - \beta_{\alpha}) + \sum_i (\Sigma_i^g - \Sigma_{s,i}^{gg}) V_i \Phi_i^g \right) \gamma^g \\ & - \sum_i \sum_{g' \in G_u} \Sigma_{s,i}^{gg'} V_i \Phi_i^{g'} \gamma^{g'} = \sum_i \left( \chi_i^g F_i V_i + \sum_{g' \notin G_u} \Sigma_{s,i}^{gg'} V_i \Phi_i^{g'} \right) \end{aligned} \quad (1.71)$$

où la somme sur l'indice  $g' \in G_u$  ne contient évidemment pas le groupe courant  $g$ . Nous avons appliqué la condition aux limites (1.56) dans l'équation ci-dessus et cette dernière conduit à un système linéaire qui est résolu par une méthode directe dans le code.

Nous pouvons considérer  $\gamma^g = 1$  pour les groupes déjà convergés dans l'itération interne courante. Pour les domaines complètement réfléchis, en faisant la somme sur tous les groupes d'énergie, nous obtenons la loi de conservation des neutrons sur le flux balancé:

$$\sum_g \sum_j \Sigma_j V_j \Phi_j^g = \sum_g \sum_j \bar{Q}_j^g V_j. \quad (1.72)$$

où  $\bar{Q}_j^g$  désigne la source balancée:

$$\bar{Q}_j^g = \chi_j^g F_j + \sum_{g'} \Sigma_{s,j}^{gg'} \Phi_j^{g'}. \quad (1.73)$$

Remarquons qu'il y a une différence entre les lois de conservation des neutrons dans l'équation (1.72) et l'équation (1.58). Pour chaque itération interne, le flux balancé satisfait l'équation (1.72), i.e. la totalité des neutrons est préservé par le flux balancé. Par conséquence, le flux convergé satisfait la loi de conservation des neutrons. Tant dis que l'équation (1.58), qui doit être satisfaite par le flux convergé, décrit seulement la loi de conservation de neutrons pour le flux convergé. Dans les

deux cas, l'utilisation de  $S'_\alpha$  à la place de  $S_\alpha$  dans l'équation (1.57) est absolument nécessaire.

### **Accélération variationnelle à un paramètre**

La méthode d'accélération variationnelle à un paramètre (voir Annexe I) est utilisée pour accélérer la convergence des itérations internes. Comme la convergence de ce procédé n'est assurée que pour une classe restreinte d'opérateurs, nous employons, dans notre code, cette accélération dynamique par cycle. Par défaut, nous faisons des cycles de 3 itérations libres suivies de 3 itérations accélérées, comme dans les méthodes d'accélération des solveurs de probabilités de collision.

Bien que la combinaison des accélérations à un paramètre et par balancement soit suffisante pour la méthode des probabilités de collisions, ce n'est pas le cas pour la méthode des caractéristiques à cause de ses propriétés intrinsèques. Le prochain chapitre sera consacré aux techniques d'accélération utilisées dans notre caractéristiques solveur dont, en particulier, la méthode SCR ( "Self-collision probability" ) et la méthode de fusionnement des lignes caractéristiques ( "Tracks merging Technique" ).

### **Procédure d'itération multigroupe**

Dans notre module des caractéristiques, les lignes d'intégration peuvent être obtenues de deux façons: soient elles sont générées par le module EXCELT du code DRAGON et sont stockées dans un fichier séquentiel, soient elles sont générées en ligne au besoin. Chacune des deux approches a des avantages et des inconvénients. La première approche calcule une seule fois des lignes, mais demande plus d'espace mémoire dans le disque rigide. Chaque accès aux lignes d'intégration nécessite une

lecture du disque rigide. Cette approche n'est pas convenable pour des problèmes dont la taille du fichier de stockage serait démesurément grande, ce qui pourrait conduire à excéder la capacité du disque rigide. La deuxième approche est développée pour contourner ce genre de problèmes. En contrepartie, les lignes d'intégration sont calculées autant de fois que le nombre d'itérations internes.

La procédure d'itération multigroupe comprend deux boucles itératives, la boucle interne et la boucle externe. Dans la boucle interne, nous calculons le flux scalaire pour une source fixe alors que, dans la boucle externe, nous mettons à jour la source de fission en utilisant le flux obtenu dans l'itération externe précédente. Une itération externe peut comprendre plusieurs itérations internes.

Pour démarrer la procédure de résolution, nous devons initialiser le flux avec une valeur approchée. Dans le cas d'une séquence de calculs en évolution, le flux convergé dans la dernière étape peut évidemment servir à l'amorçage. Alors que pour un calcul de combustible neuf, nous utilisons généralement une distribution plate qui est constante dans toutes les régions et pour tous les groupes. Dans le cas de calcul d'incrément de sections efficaces ( $\Delta\Sigma$ ), nous utilisons la solution de référence pour amorcer le calcul des sections perturbées.

Au début d'une itération externe  $n_e$ , nous utilisons le flux  $\Phi_j^{n_e-1}$  obtenu à la fin de l'itération externe  $n_e - 1$  (flux initial pour la première itération externe) pour le calcul de la source de fission, puis cette source sera utilisée dans toutes les itérations internes comprises dans l'itération externe courante. S'il s'agit d'un calcul de type B, le flux est d'abord homogénéisé après la boucle interne et puis un calcul de laplacien géométrique est effectué. Sa nouvelle valeur sera appliquée dans l'itération externe prochaine selon l'option spécifiée par l'utilisateur: SIGS ou PNL. Pour un calcul de type K ou B, la valeur de  $K_{\text{eff}}$  est toujours mise à jour afin de générer la source de fission pour la prochaine itération externe.

Dans chaque itération interne, les lignes d'intégration sont balayées une seule fois. Sur chaque ligne, le flux angulaire est calculé pour tous les groupes non convergés simultanément et est additionné au fur et à mesure pour obtenir le flux scalaire à la fin du balayage des lignes. La méthode de balancement est ensuite appliquée sur ce flux nouvellement calculé. La méthode d'accélération à un paramètre peut être utilisée selon certains critères. Comme le flux est toujours balancé avant d'appliquer la méthode d'accélération, le flux accéléré satisfait encore l'équation (1.69).

Nous utilisons la norme  $L^\infty$  pour les critères de convergence de flux multigroupe. La boucle externe est considérée convergée à l'itération externe  $n_e$  si la condition suivante est satisfaite:

$$\max_g \frac{\max_j |\Phi_j^{n_e, g} - \Phi_j^{n_e-1, g}|}{\max_j |\Phi_j^{n_e, g}|} < \varepsilon_e. \quad (1.74)$$

La boucle externe se termine soit quand elle est convergée, soit quand le nombre d'itérations externes atteint la valeur maximum  $N_e$ . Les valeurs de  $N_e$  et  $\varepsilon_e$  peuvent être spécifiées par l'utilisateur. Les valeurs par défaut sont:

$$\varepsilon_e = 5.0 \times 10^{-5}, \quad N_e = 2N_r + 1 \quad (1.75)$$

où  $N_r$  est le nombre de régions.

Pour une itération externe donnée, la boucle interne correspondante  $n_i$  est considérée convergée si la condition suivante est satisfaite:

$$\max_g \frac{\max_j |\Phi_j^{n_i, g} - \Phi_j^{n_i-1, g}|}{\max_j |\Phi_j^{n_i, g}|} < \varepsilon_i. \quad (1.76)$$

Dans l'équation ci-dessus, l'index d'itération externe est omis et nous sous-entendons que les  $n_i$  représentent les itérations internes de l'itération externe cou-



rante. La boucle interne se termine soit quand elle est convergée, soit quand le nombre d'itérations internes atteint la valeur maximum  $N_i$ . Pour les premières itérations externes, il n'est pas nécessaire de faire converger leurs boucles internes correspondantes, car une solution "convergée" dans un groupe peut encore changer considérablement lors de la prochaine itération externe à cause de la modification de la source de fission. Ainsi le nombre maximum d'itérations  $N_i$  pour la boucle interne de l'itération externe  $n_e$  est définie par:

$$N_i = \max(n_e, N_{i,0}). \quad (1.77)$$

Comme  $\varepsilon_i$ , la valeur de  $N_{i,0}$  peut être spécifiée par l'utilisateur. Les valeurs typiques de  $\varepsilon_i$  et de  $N_{i,0}$  sont:

$$\varepsilon_i = 5.0 \times 10^{-5}, \quad N_{i,0} = 2G \quad (1.78)$$

où  $G$  est le nombre de groupes.

Dans la Fig. 1.6. nous montrons la procédure d'itération pour un calcul de type K dans lequel les lignes d'intégration sont générées préalablement par un module externe (module EXCELT de DRAGON) et stockées dans un fichier séquentiel.

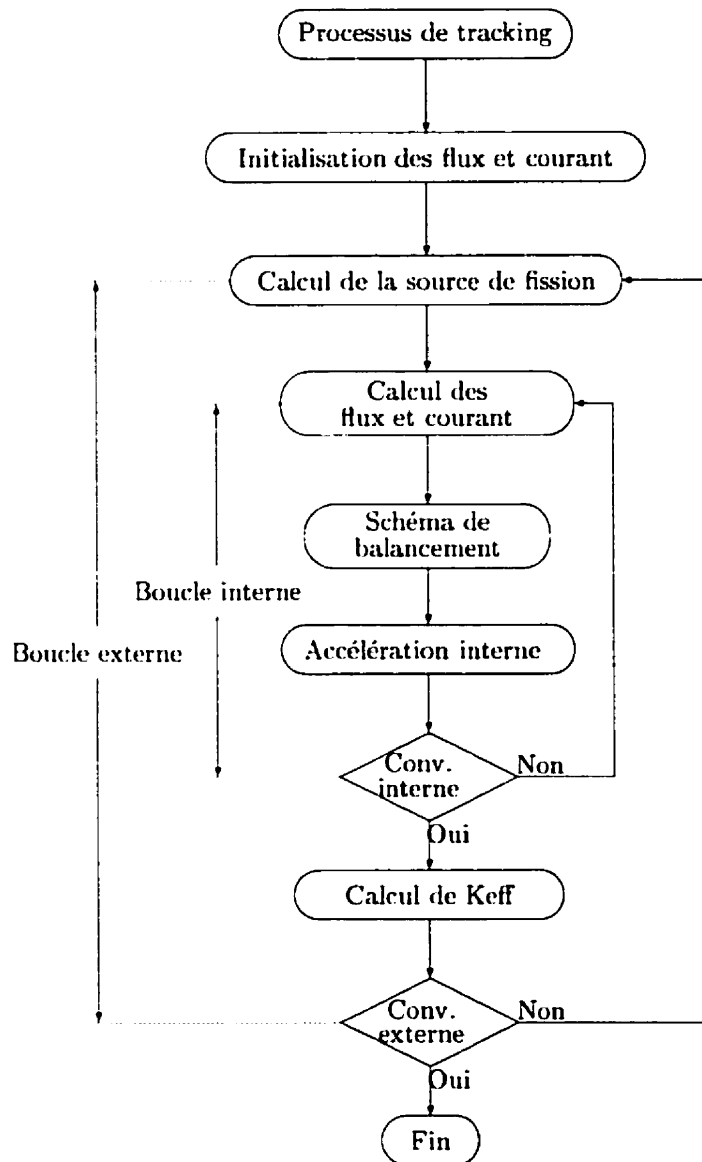


Figure 1.6 Schéma d'itération multigroupe

## CHAPITRE 2

### MÉTHODES D'ACCELÉRATION

#### 2.1 Introduction

Nous avons décrit la méthode des caractéristiques dans le chapitre précédent. Jusqu'à maintenant, les mêmes techniques d'accélération que la méthode des probabilités de collision classique de DRAGON, tels que le balancement de groupe et l'accélération à un paramètre, sont utilisées pour la méthode des caractéristiques. Bien que ces techniques d'accélération se sont avérées adéquates pour la méthode des probabilités de collision (HÉBERT A., 1985), elles ne sont pas suffisantes pour la méthode des caractéristiques. Pour un calcul typique de supercellule d'un réacteur CANDU, la méthode des caractéristiques nécessite deux fois plus d'itérations par rapport à la méthode classique des probabilités de collision dans le code DRAGON. Ce phénomène de ralentissement sur la convergence est dû à plusieurs raisons qui seront expliquées dans la section suivante. Plusieurs techniques d'accélération ont été développées pour et/ou utilisées par la méthode des caractéristiques. D'autres techniques d'accélération pourraient aussi être utilisés spécifiquement pour la méthode des caractéristiques. Nous allons présenter quelques-unes de ces techniques dans la section 2.3. L'efficacité d'un calcul itératif repose sur deux aspects: le nombre d'itérations et la performance des routines utilisées dans l'itération interne. Nos routines sont soigneusement écrites afin d'optimiser le calcul dans chacune des itérations internes. Plus particulièrement, nous avons développé la technique de fusionnement des lignes d'intégration, appelé aussi la TMT pour l'abréviation de "Track Merging Technique" (WU G.J. and ROY R., 2000), dont l'objectif initial est de réduire le nombre total des lignes à

balayer dans chaque itération. Nous allons présenter cette technique dans la section 2.4 et nous y montrerons que la TMT offre une approximation de deuxième ordre par rapport aux lignes d'intégration équidistantes. Le nombre d'itérations est aussi très important pour une méthode comme celle des caractéristiques, car la majorité du temps CPU est consommée par le calcul répétitif des fonctions exponentielles dans les itérations internes. Nous avons développé la méthode SCR ("Self-Collision Rebalancing") pour réduire le nombre total des itérations dans la résolution des problèmes multigroupes (WU G.J. and ROY R., 1999). La méthode SCR, basée sur l'équivalence des méthodes des caractéristiques et des probabilités de collision, s'est avérée très efficace dans les calculs supercellules des réacteurs type CANDU. Nous allons ensuite montrer l'équivalence de la méthode des caractéristiques et la méthode des probabilités de collision dans la section 2.5 avant d'aborder la méthode SCR elle-même dans la section 2.6.

## **2.2 Comparaison des techniques d'accélération utilisées dans le code DRAGON**

La méthode des probabilités de collision calcule explicitement des probabilités de collision, des probabilités de fuite et des probabilités de transmission. Il est très facile d'éliminer les courants aux surfaces externes par quelques conversions algébriques. En conséquence, un problème mono-énergétique à source fixe peut être résolu en une seule itération. Par contre, il est difficile de faire disparaître les courants aux surfaces externes dans le développement de la méthode des caractéristiques à moins d'utiliser des lignes d'intégration cycliques comme dans CACTUS et MOCC (HALSALL M. J., 1980; ROY R., 1998a). Pour l'instant, il n'y a pas encore d'utilisation de lignes cycliques dans le cadre des géométries de trois dimensions: ces lignes sont très longues à cause de la troisième dimension et peu efficaces. Nous sommes donc obligés de démarrer la procédure itérative en utilisant

un courant entrant approché. Ainsi, à cause de l'incertitude introduite par la valeur initiale du courant entrant, plusieurs itérations seront nécessaires même pour un problème de source mono-énergétique.

Dans la méthode des probabilités de collision, comme les matrices de probabilités sont construites une seule fois pour tous les groupes d'énergie et qu'elles sont toutes stockées par la suite dans la mémoire physique de l'ordinateur, la procédure itérative de type Gauss-Seidel est donc implantée dans le solveur multigroupe (module ASM de DRAGON (MARLEAU G. and HÉBERT A., 1997)) de la méthode des probabilités. Pour chaque itération interne, l'équation multigroupe est résolue groupe par groupe en allant de la plus haute énergie vers la plus basse. Le flux des groupes rapides (de haute énergie), obtenu dans l'itération courante, est tout de suite utilisé pour générer la source de diffusion dans le calcul des groupes d'énergie inférieure. Ce schéma est particulièrement avantageux à cause de la forme des matrices de transfert dans les groupes rapides où il n'y a pas de remontée de neutrons. Ainsi une seule itération est suffisante pour obtenir le flux pour les groupes rapides grâce à l'élimination des courants aux surfaces externes dans le système. Le schéma de Gauss-Seidel pourrait aussi être utilisé pour la méthode des caractéristiques. Mais il y aurait un prix à payer pour son utilisation. Nous avons vu dans le chapitre précédent qu'il faut faire, à chaque itération interne, un balayage complet des lignes d'intégration pour un problème mono-énergétique. Ainsi, si nous utilisons le schéma de Gauss-Seidel dans la méthode des caractéristiques, il faudrait, à chaque itération interne, faire  $G_u$  fois le balayage complet des lignes d'intégration où  $G_u$  est le nombre de groupes d'énergie non convergés. Pour un calcul supercellule typique d'un réacteur CANDU, un supercellule de barre de compensation par exemple, la grandeur du fichier des lignes d'intégration est de l'ordre de quelques dizaines méga-octets selon l'exigence sur la précision et il y a 69 ou 89 groupes d'énergie selon la librairie choisie. Il est tout simplement inacceptable, dans une

seule itération interne, de lire ou de générer les lignes d'intégration autant de fois que le nombre de groupes d'énergie. En conséquence, le schéma de Jacobi est utilisé dans la méthode des caractéristiques, c'est à dire qu'il y a un seul balayage des lignes d'intégration par itération interne et que le flux est calculé simultanément pour tous les groupes non convergés lors du balayage unique des lignes. Il est bien connu que le schéma de Jacobi est moins efficace que le schéma de Gauss-Seidel à tout le moins comme solveur d'un système algébrique (VARGA R. S., 1963).

La méthode des probabilités de collision manipule directement le flux scalaire via des matrices de probabilités. Pour accélérer le calcul multigroupe, il est donc très commun, pour la méthode des probabilités, de faire disparaître le terme de transfert du groupe à lui-même en faisant une réduction algébrique matricielle. Cette technique est encore plus avantageuse si le taux de diffusion est élevé comme dans le cas des réacteurs CANDU. Tandis que la méthode des caractéristiques calcule intrinsèquement le flux angulaire en balayant toutes les lignes d'intégration, il n'est pas directement possible d'appliquer une telle réduction. Par contre, lorsque le taux de diffusion s'approche de la section efficace totale, la réduction algébrique devient presque singulière ce qui peut poser des problèmes d'inversion.

Malgré toutes ces difficultés rencontrées par la méthode des caractéristiques, il est plausible que la méthode des caractéristiques devienne plus efficace que la méthode des probabilités de collision pour des problèmes dont le nombre de régions est très élevé. En effet, le temps CPU pour résoudre un problème avec la méthode des caractéristiques est linéaire par rapport au nombre de régions tandis que celui de la méthode des probabilités des collisions est quadratique. Ainsi, des méthodes d'accélération plus performantes seront toujours les bienvenues afin de rendre la méthode des caractéristiques plus compétitive dans le calcul des problèmes de grandeur moyenne. C'est donc dans ce contexte que les méthodes TMT et SCR ont été développées.

## 2.3 Techniques d'accélération pour la méthode des caractéristiques

### Méthode de balancement des groupes d'énergie dans CACTUS

Le solveur caractéristique CACTUS du code WIMS8, qui est maintenant considéré précis et efficace (HALSALL M. J., 1998), utilise la méthode de balancement des groupes d'énergie comme méthode d'accélération depuis des années. À la fin de chaque itération, pondérés par le flux et le volume, les propriétés nucléaires sont homogénéisées selon la convention classique (STAMMLER R. J. J. and ABBATE M. J., 1983). Le calcul du flux homogène du problème basé sur les propriétés homogénéisées se fait de façon itérative et non accélérée:

$$\Phi^{g,l+1} = \frac{Q^{g,l}}{\Sigma^g} \quad (2.1)$$

où

$$Q^{g,l} = \chi^g \sum_{g'} \nu \Sigma_f^{g'} + \sum_{g'} \Sigma_{s'}^{gg'} \Phi^{g',l} \quad (2.2)$$

où l'index  $l$  désigne le nombre d'itération. Le facteur de multiplication dans un milieu infini  $K_\infty^{l+1}$ , défini par:

$$K_\infty^{l+1} = \sum_g \nu \Sigma_f^g \Phi^{g,l+1} \quad (2.3)$$

est calculé à chaque itération pour le problème homogène. La résolution du problème homogène est considérée convergée quand deux itérations successives donnent deux valeurs de  $K_\infty$  suffisamment proches. Ensuite, les facteurs de balancement sont appliqués sur le flux obtenu par CACTUS pour que le flux balancé soit cohérent à la solution homogène convergée. La méthode d'accélération de Chebyshev est enfin utilisée sur le flux balancé. Ce schéma est particulièrement

intéressant pour les problèmes multigroupes des réacteurs à eau légère (HALSALL M. J., 1990; HALSALL M. J., 1980).

### Méthode TSA de Zika et Adams

Zika et Adams ont développé la méthode TSA ("Transport Synthetic Acceleration"), méthode d'accélération synthétique de transport, pour l'appliquer dans leur solveur qui résout des problèmes de transport au niveau d'assemblage en deux dimensions en utilisant la méthode des caractéristiques (ZIKA M. R. and ADAMS M. L., 1998).

Soient  $\phi_i^{l+1/2}$  et  $\Phi^{l+1/2}$  respectivement les flux angulaires et scalaires obtenus par la méthode caractéristiques dans l'itération  $l$ , et soient  $\phi_i^*$  et  $\Phi^*$  les solutions convergées des flux angulaires et scalaires du problème discrétisé. Les corrections exactes supplémentaires des flux angulaires et scalaires sont définies par:

$$\begin{aligned} f_i^{l+1/2}(\vec{r}) &= \phi_i^* - \phi_i^{l+1/2} \\ F^{l+1/2}(\vec{r}) &= \Phi^* - \Phi^{l+1/2} \end{aligned} \quad (2.4)$$

où l'indice  $i$  dénote une direction angulaire spécifique  $\hat{\Omega}_i$ . L'équation de bilan pour les corrections est donc donnée en se basant sur le résidu du flux scalaire:

$$\left( \hat{\Omega}_i \cdot \vec{\nabla} + \Sigma \right) f_i^{l+1/2}(\vec{r}) = \Sigma_s F^{l+1/2}(\vec{r}) + \Sigma_s (\phi^{l+1/2} - \phi^l) \quad (2.5)$$

L'équation précédente est complétée par une relation entre la correction du flux scalaire et la correction du flux angulaire donnée par la somme sur la quadrature



angulaire:

$$F^{l+1/2}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \sum_i^M \omega_i f_i^{l+1/2}(\vec{r}) \quad (2.6)$$

Au lieu de résoudre l'équation des corrections exactes (2.5), la méthode TSA résout une équation de transport modifiée dans laquelle la section de diffusion est réduite artificiellement d'un facteur  $\beta$  de la façon suivante:

$$\left( \hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \Sigma - \beta \Sigma_s \right) f_i^{l+1/2}(\vec{r}) = \Sigma_s F^{l+1/2}(\vec{r}) + (1 - \beta) \Sigma_s (\phi^{l+1/2} - \phi^l) \quad (2.7)$$

où  $\beta$  peut en principe prendre n'importe quelle valeur dans l'intervalle  $[0, 1]$ . Les équations de correction sont résolues en utilisant la méthode de gradient conjugué. Nous remarquons que, dans la limite de  $\beta = 1$ , la TSA réduit à la méthode de "Two Step Acceleration" (LARSEN E. W. and MILLER W. F., 1986).

### Méthode ADR de Hong et Cho

La méthode ADR ("Angular Dependent Rebalance"), méthode de balancement dépendant de l'angle, a été étudiée par S.G. Hong et N.Z. Cho et a été appliquée afin d'accélérer l'itération de source de diffusion pour les problèmes du transport discrétisés dans les maillages triangulaires équilatéraux (HONG S. G. and CHO N. Z., 1999). La méthode utilisée pour résoudre des problèmes du transport discrétisés est nommé Step Characteristic (SI). La méthode SI ressemble beaucoup à la méthode de Larsen, présentée dans la section 0.2, dans le sens où il n'y a pas de lignes explicitement générées et l'équation discrétisée est résolue analytiquement et rigoureusement dans chaque région individuelle. Mais, par rapport à la méthode de Larsen, chaque région est un triangle équilatéral au lieu d'un rectangle et le flux est constant au lieu de linéaire. Le facteur de balancement est tout simplement

le rapport de la nouvelle valeur du flux angulaire à l'ancienne. Ainsi, le facteur de balancement représente le niveau de convergence de la procédure d'itération, c'est à dire que la procédure d'itération est convergée si le facteur de balancement devient l'unité. La dépendance angulaire du facteur de balancement est approchée par l'approximation  $S_2$  qui se traduit par une distribution angulaire uniforme de facteur de balancement dans chaque sextant angulaire. La méthode de gradient conjugué est utilisée pour résoudre l'équation des facteurs de balancement. Bien que la méthode ADR s'avère efficace pour l'accélération d'itération de source diffusion dans cette approche, la précision des résultats obtenus est assez limitée à cause du schéma de discrétisation de transport (HONG S. G. and CHO N. Z., 1999).

### **Méthode d'accélération synthétique de Sanchez et Chetaine**

Sanchez et Chetaine ont développé une autre méthode d'accélération synthétique dans leur approche de la méthode des caractéristiques pour des maillages non réguliers en deux dimensions (SANCHEZ R. and CHETAINE A., 1999). Cette méthode d'accélération est basée sur l'approximation suivante:

les flux entrant et sortant sont uniformes sur chacune des surfaces des régions individuelles:

le flux dans une région par une de ses surfaces isotrope par rapport à la direction d'entrée.

Après un balayage complet des lignes d'intégration, pour une région donnée (région  $j$  par exemple) l'équation de bilan suivante:

$$\sum_{\alpha \in \partial_j} (J_{+, \alpha_j} - J_{-, \alpha_j}) + \Sigma_j V_j \Phi_j = V_j Q_j \quad (2.8)$$

est obtenue sans approximation supplémentaire. Dans l'équation ci-dessus, nous remarquons que:

- $\alpha$  est une surface de la région  $j$ :
- la somme sur  $\alpha$  couvre toutes les surfaces de la frontière  $\partial j$  de la région:  
les symboles  $J_{-, \alpha j}$  et  $J_{+, \alpha j}$  sont utilisés pour désigner respectivement les courants entrant et sortant de la surface  $\alpha$ .

Pour compléter l'équation (2.8), Sanchez et Chetaine ont introduit les équations aux interfaces en provenance de la région  $j$ :

$$J_{+, \alpha j} = \sum_{\beta \in \partial j} P_{\alpha, \beta} J_{-, \beta j} + p_{\alpha j} V_j Q_j \quad \alpha \in \partial j \quad (2.9)$$

où  $P_{\alpha, \beta}$  est la probabilité de transmission de la surface  $\beta$  à la surface  $\alpha$  et  $p_{\alpha j}$  la probabilité de fuite de la région  $j$  par la surface  $\alpha$ . Nous rappelons que les symboles grecs dénotent les surfaces locales de la région dans cette section, et les mêmes symboles sont utilisés ailleurs dans cette thèse pour dénoter les surfaces externes du domaine étudié. Quand les équations (2.8) et (2.9) sont utilisées pour accélérer la résolution du problème,  $\Phi_j$  et  $J_{\pm, \beta j}$  sont remplacés par les corrections du flux scalaire, des courants entrants et sortants correspondants. La source  $Q_j$  est, par conséquent, devenue:

$$Q_j^{l+1} = \sum_{\alpha, j} F_j^{l+1/2} + \sum_{\alpha, j} (\Phi_j^{l+1/2} - \Phi_j^l) \quad (2.10)$$

où  $F_j^{l+1/2}$  est la correction du flux scalaire.

Les inconvénients de cette méthode d'accélération proviennent des constatations suivantes:

les équations (2.8) et (2.9) ne sont pas symétriques et leur traitement n'est

donc pas très rapide:

- à cause de l'utilisation des courants aux interfaces, le système d'accélération peut être inacceptablement grand quand il y a beaucoup de régions à traiter.

### Méthodes d'accélération dans MCCG

Le code MCCG ("Method of Characteristics in Complicated Geometry"), basée sur la méthode des caractéristiques comme indiqué par son nom, résout l'équation du transport dans des géométries non régulières en deux dimensions et en trois dimensions. Deux méthodes d'accélération sont disponibles pour les itérations internes:

méthode de CFR ("Current/Flux Ratio"): Après chaque procédure classique de la méthode des caractéristiques dans une itération interne, les facteurs  $\gamma_{ij} = J_{ij}^{l+1/2} / \Phi_i^{l+1/2}$  sont calculées pour les régions  $i$  et  $j$  qui sont voisines.  $J_{ij}$  désigne le courant de la région  $i$  vers la région  $j$ . Ensuite, le système des équations suivantes:

$$-\sum_i \gamma_{ij} \Phi_i^{l+1} + \sum_i (\gamma_{ji} + \Sigma_j - \Sigma_{s,j}) V_j \Phi_j^{l+1} = Q_j V_j \quad (2.11)$$

est résolu afin de trouver le flux accéléré  $\Phi_j^{l+1}$ . L'indice  $i$ , dans l'équation ci-dessus, parcourt toutes les régions voisines de la région  $j$ :

- méthode de CDD ("Consistent Diffusion Differencing"): Dans cette méthode, les équations d'accélération sont généralement obtenues en combinant les équations de balance nodale avec les équations de couplage spatial qui sont des relations, entre les cellules voisines, des courants moyens sur les surfaces de cellule et les flux moyens dans les cellules (KHALIL H., 1988). Alors que les courants moyens des cellules ne sont pas disponibles pour la méthode des

caractéristiques. Suslov a modifié la dérivation des équations CDD afin que la méthode de CDD puisse être utilisée directement sur les lignes d'intégration (SUSLOV I. R., 1994).

## 2.4 Fusionnement des lignes

Dans cette section, nous introduisons la technique de fusionnement des lignes d'intégration en vue de minimiser l'effort de calcul. Au début, seulement les lignes fusionnables et voisines sont fusionnées alors que, dans la pratique, les lignes fusionnables ne sont pas toujours voisines. Ceci nous conduit à introduire la notion de fusionnement à deux niveaux. Le fusionnement au niveau 1 fusionne seulement les lignes fusionnables voisines, alors que le fusionnement au niveau 2 fusionne toutes les lignes fusionnables présentes dans les lignes d'intégration générées par le module EXCELT du code DRAGON. Le fusionnement au niveau 2 nécessite un tri sur l'ensemble des lignes d'intégration.

Dans le chapitre suivant, nous allons élaborer la notion de fusionnement en notion de macrobande.

### Fusionnement des lignes au niveau 1

Si nous regardons le fichier des lignes d'intégration généré par le module EXCELT du code DRAGON, nous pouvons observer qu'il arrive souvent que les lignes voisines, c'est-à-dire les lignes successivement générées par EXCELT, traversent les mêmes régions et cela dans exactement le même ordre. En plus, les longueurs des segments correspondants sur les lignes voisines sont assez proches les uns aux autres. Ce sont donc des lignes *fusionnables*. Comme il est illustré dans la figure 2.1-(a), les lignes voisines marquées de même lettre sont fusionnables, c'est

à dire que les lignes **a1** et **a2** sont fusionnables, et que les lignes **b1** et **b2** sont fusionnables etc. Pour la même géométrie, plus les lignes d'intégration sont denses, plus les lignes fusionnables sont nombreuses.

La technique de fusionnement joindra les lignes fusionnables en une seule ligne afin de réduire l'effort de calcul de la méthode des caractéristiques. Le poids de la ligne fusionnée est la somme des poids de ses lignes fusionnables et la longueur d'un segment sur la ligne fusionnée est la moyenne des segments correspondants sur ses lignes fusionnables. En ce faisant, si les lignes originales sont normalisées selon l'une des procédures de normalisation décrites dans la section 1.1, les lignes fusionnées gardent la même propriété de normalisation et sont donc automatiquement normalisées en conséquence. La figure 2.1-(b) illustre les lignes fusionnées des celles dans la figure 2.1-(a). La ligne **a** est la ligne fusionnée des lignes **a1** et **a2**, la ligne **b** est la ligne fusionnée des lignes **b1** et **b2**, et ainsi de suite. Pour un problème d'une seule région, la technique de fusionnement ressemble à la corde moyenne utilisée pour évaluer la probabilité de fuite (GEORGE I. B. and GLASS-TONE S., 1979). Par contre, la corde moyenne est une moyenne à la fois spatiale et angulaire alors que le fusionnement des lignes traite les lignes pour chaque direction donnée individuellement.

## Fusionnement des lignes au niveau 2

Dans le module EXCELT du code DRAGON, les lignes d'intégration sont générées de façon équidistante et par niveau de balayage pour les géométries de trois dimensions. Nous allons maintenant donner plus de détails sur cette approche. Comme nous avons vu dans la section 1.1, pour une direction  $\hat{\Omega}$  choisie dans la quadrature angulaire, trois bases orthonormées sont utilisées à tour de rôle pour générer les lignes d'intégration. Soit  $\{\hat{\Omega}, e_1, e_2\}$  une des trois bases, le plan perpendiculaire

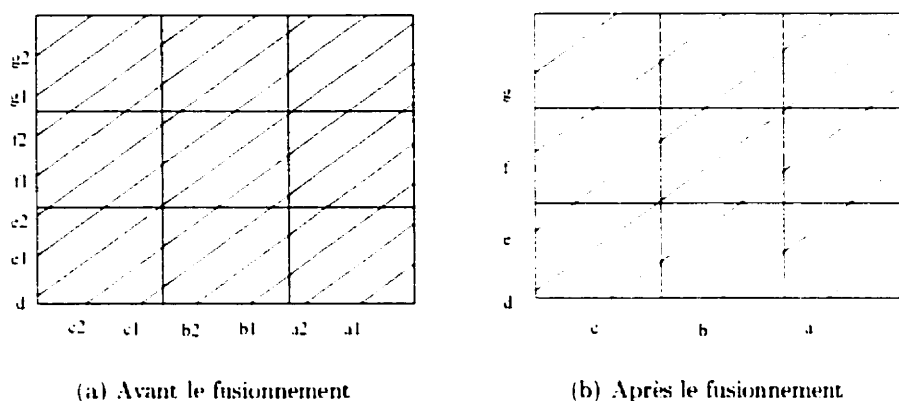


Figure 2.1 Fusionnement des lignes d'intégration.

$\pi_\Omega$  est marqué de niveau de balayage à une distance constante suivant un vecteur de base sur le plan, disons le vecteur  $e_2$ . Les lignes sont tracées sur un niveau de balayage à la même distance constante que celle entre les niveaux en suivant le vecteur de base  $e_1$ . Quand la procédure de tracé de lignes est terminée sur le niveau courant, elle commence sur le prochain niveau. Ainsi, il peut aussi avoir des lignes fusionnables dans la direction  $e_2$ . Mais, à cause de l'ordre dans lequel les lignes sont tracées, les lignes fusionnables dans la direction  $e_2$  ne sont pas prises en compte dans la section précédente, car elles ne sont pas voisines les unes aux autres.

Quand deux lignes sont fusionnées en une seule, nous nous attendons généralement que la ligne fusionnée se trouve au milieu des deux lignes originales. Il peut arriver que la ligne fusionnée devienne "virtuelle". Nous allons maintenant expliquer le sens de "virtuelle" dans une géométrie à deux dimensions sur un fusionnement au niveau 2. Dans la figure 2.2, les deux lignes **a1** et **a2** rencontrent les mêmes régions alors que la ligne **b** rencontre une région de plus que **a1** et **a2**. Par définition, les **a1** et **a2** sont fusionnables au niveau 2. Par contre, si nous traçons une troisième ligne au milieu, géométriquement, des **a1** et **a2**, cette dernière va rencontrer les

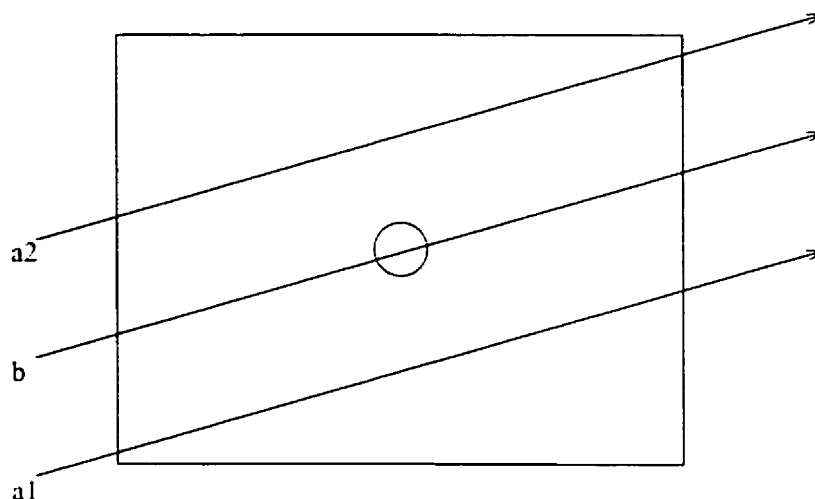


Figure 2.2 Ligne virtuelle dans un fusionnement au niveau 2.

mêmes régions que la ligne **b** qui sont différentes que celles rencontrées par **a1** et **a2**. Ainsi la ligne fusionnée de **a1** et **a2** perd son sens physique et est devenue virtuelle.

Remarquons qu'il peut y avoir des lignes virtuelles même pour le fusionnement au niveau 1 si la géométrie est en trois dimensions. Il est expliqué dans la section 1.1, pour une direction donnée, que chaque région doit rencontrer au moins une ligne d'intégration dans cette direction. Comme les lignes sont générées par niveau de balayage, alors pour un certain niveau de balayage, il est possible qu'une région ne soit pas touchée par aucune ligne du niveau et que deux lignes voisines soient fusionnées en une ligne virtuelle traversant cette région.

Le fusionnement des lignes au niveau 2 commence par un tri sur l'ensemble des lignes d'intégration en vue que les lignes fusionnables sont devenues voisines. Ainsi le fusionnement des lignes se réalise sur l'ensemble des lignes et le nombre des lignes fusionnées sont considérablement réduit. Le tri porté sur l'ensemble des lignes originales est un travail supplémentaire pour le calcul de transport. Pour raison de performance, nous gardons toutes les lignes fusionnées dans la mémoire



physique durant la procédure de tri. Pour un calcul supercellule d'une barre de compensation dans un maillage normal, le fichier des lignes d'intégration est de l'ordre d'une dizaine de Mo, le tri se réalise assez rapidement. Si le maillage raffiné est à considérer, la taille du fichier des lignes peut facilement atteindre une ou plusieurs centaines de Mo. Le tri devient un véritable goulot d'étranglement voir un cauchemar pour un Pentium à 333 Mhz. Il est possible que le mémoire disponible soit insuffisante pour un problème comportant un très grand nombre de régions. Bien qu'en général, l'effort de tri pourra être compensé par le gain sur le calcul dans chaque itération, il arrive que le fusionnement au premier niveau est plus rapide que celui au deuxième niveau à cause du problème de tri. Une solution plus radicale consiste de générer seulement les lignes nécessaires lors de la procédure de tracking. Tous problèmes de tri ont donc disparus. Nous allons introduire le concept de macrobande dans la section 3.3 qui pourra être développé pour vue d'une procédure de tracking automatique et intelligent.

### **Ordre d'approximation du fusionnement des lignes**

Nous allons maintenant montrer que la technique de fusionnement des lignes est une approximation du deuxième ordre des lignes originales par rapport à la variation de longueur des segments. Supposons que les longueurs d'un segment correspondant sur deux lignes fusionnables sont  $L' = L + \varepsilon$  et  $L'' = L - \varepsilon$  respectivement et que la longueur du segment correspondant sur la ligne fusionnée est par conséquent  $L$ . Pour des régions vides, le résultat obtenu sur une ligne fusionnée est exactement le même que ceux obtenus sur les lignes fusionnables originales. Nous pouvons donc supposer que la région traversée par le segment  $L$  (ou  $L'$ ,  $L''$ ) n'est pas vide. En plus, le flux entrant  $\phi_{in}$  est supposé identique sur ces trois lignes afin de faciliter notre démonstration. En appliquant les équations (1.33) et (1.34) sur ces trois

lignes, nous pouvons obtenir les flux sortants:

$$\phi'_{\text{out}} = \phi_{\text{in}} e^{-\sigma(L+\varepsilon)} + \frac{q}{\sigma} (1 - e^{-\sigma(L+\varepsilon)}) \quad (2.12)$$

$$\phi''_{\text{out}} = \phi_{\text{in}} e^{-\sigma(L-\varepsilon)} + \frac{q}{\sigma} (1 - e^{-\sigma(L-\varepsilon)}) \quad (2.13)$$

$$\phi_{\text{out}} = \phi_{\text{in}} e^{-\sigma L} + \frac{q}{\sigma} (1 - e^{-\sigma L}) \quad (2.14)$$

et les flux intégrés sur le segment:

$$\sigma L' \phi' = \phi_{\text{in}} (1 - e^{-\sigma(L+\varepsilon)}) + \frac{q}{\sigma} (\sigma(L+\varepsilon) - 1 + e^{-\sigma(L+\varepsilon)}) \quad (2.15)$$

$$\sigma L'' \phi'' = \phi_{\text{in}} (1 - e^{-\sigma(L-\varepsilon)}) + \frac{q}{\sigma} (\sigma(L-\varepsilon) - 1 + e^{-\sigma(L-\varepsilon)}) \quad (2.16)$$

$$\sigma L \phi = \phi_{\text{in}} (1 - e^{-\sigma L}) + \frac{q}{\sigma} (\sigma L - 1 + e^{-\sigma L}) \quad (2.17)$$

Pour  $\varepsilon$  suffisamment petit, nous pouvons écrire la relation suivante:

$$e^{-\sigma\varepsilon} + e^{\sigma\varepsilon} - 2 = O(\varepsilon^2) \quad (2.18)$$

qui peut être facilement prouvée en utilisant le développement en série des deux fonctions exponentielles et en considérant  $\sigma$  comme une valeur constante non nulle. Nous allons distinguer, dans notre démonstration, les deux situations suivantes: le flux entrant non nul  $\phi_{\text{in}} \neq 0$  et le flux entrant nul  $\phi_{\text{in}} = 0$ .

### Cas de $\phi_{\text{in}} \neq 0$

Si le flux entrant n'est pas nul, comme la région n'est pas vide non plus, nous pouvons convenablement supposer qu'il existe deux constantes strictement positives

$M_1$  et  $M_2$  telles que:

$$\min(\phi_{\text{in}}, \frac{q}{\sigma}) \geq M_1, \quad \max(\phi_{\text{in}}, \frac{q}{\sigma}) \leq M_2 \quad (2.19)$$

En basant sur ces hypothèses, nous pouvons estimer l'erreur introduite par le fusionnement des lignes sur le flux angulaire sortant du segment et sur le flux angulaire moyen du segment. L'erreur relative sur le flux sortant est donnée par:

$$\left| \frac{\phi'_{\text{out}} + \phi''_{\text{out}} - 2\phi_{\text{out}}}{2\phi_{\text{out}}} \right| = \frac{|(\phi_{\text{in}} - \frac{q}{\sigma})(e^{-\sigma(L+\varepsilon)} + e^{-\sigma(L-\varepsilon)} - 2e^{-\sigma L})|}{2|\phi_{\text{in}}e^{-\sigma L} + \frac{q}{\sigma}(1 - e^{-\sigma L})|} \quad (2.20)$$

$$\leq \frac{M_2}{2M_1} (e^{-\sigma\varepsilon} + e^{\sigma\varepsilon} - 2) \quad (2.21)$$

$$= O(\varepsilon^2) \quad (2.22)$$

alors que, d'une procédure similaire, l'erreur sur le flux moyen est donnée par:

$$\left| \frac{L'\phi' + L''\phi'' - 2L\phi}{2L\phi} \right| = \frac{|(\phi_{\text{in}} - \frac{q}{\sigma})(e^{-\sigma(L+\varepsilon)} + e^{-\sigma(L-\varepsilon)} - 2e^{-\sigma L})|}{2|\phi_{\text{in}}(1 - e^{-\sigma L}) + \frac{q}{\sigma}(\sigma L - 1 + e^{-\sigma L})|} \quad (2.23)$$

$$\leq \frac{M_2}{2M_1\sigma L} (e^{-\sigma\varepsilon} + e^{\sigma\varepsilon} - 2) \quad (2.24)$$

$$= O(\varepsilon^2) \quad (2.25)$$

### Cas de $\phi_{\text{in}} = 0$

Pour le flux entrant nul, l'hypothèse (2.19) ne se tient plus. Nous allons donc avoir besoin d'autres constantes. L'erreur sur le flux sortant se calcule maintenant comme suit:

$$\left| \frac{\phi'_{\text{out}} + \phi''_{\text{out}} - 2\phi_{\text{out}}}{2\phi_{\text{out}}} \right| = \frac{|e^{-\sigma\varepsilon} + e^{\sigma\varepsilon} - 2|}{2|e^{\sigma L} - 1|} \quad (2.26)$$

Comme  $\sigma L$  est une constante strictement positive,  $e^{\sigma L} - 1$  est par conséquent une constante strictement positive. Ainsi, l'expression ci-dessus est contrôlée par  $O(\varepsilon^2)$ .

Pour l'erreur sur le flux moyen, nous pouvons écrire:

$$\left| \frac{L' \tilde{\phi}' + L'' \tilde{\phi}'' - 2L\phi}{2L\phi} \right| = \frac{|e^{-\sigma(L+\varepsilon)} + e^{-\sigma(L-\varepsilon)} - 2e^{-\sigma L}|}{2|\sigma L - 1 + e^{-\sigma L}|} \quad (2.27)$$

$$\leq \frac{e^{-\sigma L}}{2|\sigma L - 1 + e^{-\sigma L}|} |e^{-\sigma\varepsilon} + e^{\sigma\varepsilon} - 2| \quad (2.28)$$

L'expression ci-dessus est aussi contrôlée par  $O(\varepsilon^2)$ , car l'expression suivante:

$$\frac{e^{-\sigma L}}{2|\sigma L - 1 + e^{-\sigma L}|} \quad (2.29)$$

elle aussi, est une constante strictement positive.

Maintenant, nous avons prouvé que, dans tous les cas possibles, la technique de fusionnement des lignes est une approximation du deuxième ordre des lignes originales par rapport à la variation de longueur des segments. Normalement, pour la méthode des caractéristiques comme pour la méthode des probabilités de collision, plus de lignes d'intégration conduisent à une meilleur précision. L'application de la technique de fusionnement des lignes entraîne théoriquement une perte de précision. Actuellement, dans l'implantation de la technique de fusionnement des lignes, toutes les lignes fusionnables sont fusionnées afin de réduire au maximum l'effort du calcul. Il s'avère peut-être nécessaire de faire un certain compromis entre la performance et la précision. Par exemple, il sera facile de limiter à une valeur constante, spécifiée par l'utilisateur par exemple, le nombre maximum des lignes qui seront fusionnées en une seule afin d'avoir un contrôle plus raffiné sur le niveau d'approximation de cette technique de fusionnement. Une autre option disponible dans le module permet à l'utilisateur, s'il le souhaite, de faire un premier calcul sur l'ensemble des lignes fusionnées et de refaire un deuxième calcul sur l'ensemble des lignes originales.

Pourtant, comme nous le démontrerons dans le chapitre de résultats, la technique de fusionnement des lignes au premier niveau conduit à d'excellents résultats tout en éliminant plus de la moitié des lignes. À notre surprise, même le fusionnement au deuxième niveau conduit aux très bons résultats avec le nombre de lignes grandement réduit.

Le code DRAGON applique une approche de lignes équidistantes dans son calcul de transport. En dépit du fait que toutes les lignes équidistantes aient le même poids, cette approche des lignes n'est pas toujours avantageuse pour la raison qui suit. S'il y a une seule région qui est de taille réduite par rapport à la grandeur moyenne des régions, une haute densité de lignes d'intégration doit être utilisée pour avoir une bonne précision sur le flux moyen de cette petite région tandis que, dans toutes les autres régions, une densité de lignes beaucoup moins élevée peut s'avérer suffisante. En conséquence, l'effort de calcul est grandement augmenté afin de satisfaire l'exigence de précision dans la petite région. Dans un futur proche, notre technique de fusionnement pourra servir de base dans une procédure de traçage automatique et intelligent qui prendra en compte les propriétés géométriques du problème étudié. Par conséquent, les lignes d'intégration ne seront plus nécessairement équidistantes et le poids qui leur associe variera d'une ligne à l'autre.

## **2.5 Équivalence entre la méthode des caractéristiques et la méthode des probabilités de collision**

L'équivalence entre la méthode des caractéristiques et la méthode des probabilités de collision a déjà été prouvée pour un domaine infini (ROY R., 1998a). En suivant le même raisonnement, nous allons prouver l'équivalence des deux méthodes pour un domaine fini. Seulement les conditions isotropes aux frontières seront considérées dans notre démonstration. Pour simplifier l'écriture des équations,

nous allons introduire, dans le cas de  $\sigma_k \neq 0$ , les facteurs suivants sur le segment  $k$  de la ligne d'intégration  $\vec{T}$ :

$$c_k(\vec{T}) = \frac{1 - e^{-\sigma_k L_k}}{\sigma_k} \quad (2.30)$$

$$d_k(\vec{T}) = \frac{L_k - c_k(\vec{T})}{\sigma_k} \quad (2.31)$$

Dans le cas où le segment se trouve dans une région vide, c'est à dire  $\sigma_k = 0$ , les facteurs ci-dessus seront définis par leur valeurs au limite respectivement:

$$c_k(T) = L_k, \quad d_k(\vec{T}) = \frac{1}{2} L_k^2 \quad (2.32)$$

Nous allons maintenant ajouter au terme général  $L_k \bar{\phi}_k(\vec{T})$  toutes les contributions possibles tout en éliminant explicitement de la formule les valeurs du flux angulaire sur les points d'intersection  $\vec{r}_l$  pour  $l = 1, 2, \dots, k-1$ . Pour commencer, nous allons réécrire l'équation du flux moyen (1.34) sur le segment  $k$  et l'équation du flux angulaire (1.33) sur le point d'intersection  $\vec{r}_l$  dans des formes convenables à notre démonstration tout en utilisant les facteurs nouvellement introduits:

$$L_k \bar{\phi}_k(\vec{T}) = q_k d_k(\vec{T}) + \phi_{k-1}(\vec{T}) c_k(\vec{T}) \quad (2.33)$$

$$\phi_l(\vec{T}) = \phi_{l-1}(\vec{T}) e^{-\sigma_l L_l} + q_l c_l(\vec{T}) \quad (2.34)$$

En appliquant successivement l'équation (2.34), pour les segments  $l = k-1, \dots, 2, 1$  dans l'équation (2.33), nous pouvons éliminer explicitement le flux angulaire sur tous les points d'intersection sauf  $\vec{r}_0$  qui est le point d'entrée du domaine. Enfin, nous finissons par trouver une équation du flux moyen sur le segment  $k$  dans laquelle

le flux angulaire intermédiaire aux points d'intersection est explicitement éliminé:

$$L_k \bar{\phi}_k(\vec{T}) = q_k d_k(\vec{T}) + \sum_{l=1}^{k-1} q_l c_l(\vec{T}) e^{-\tau_{l,k-1}} c_k(\vec{T}) + \phi_0(\vec{T}) e^{-\tau_{1,k-1}} c_k(\vec{T}) \quad (2.35)$$

Le parcours optique  $\tau_{nk}$  dans l'équation ci-dessus est défini par:

$$\tau_{nk} = \begin{cases} \sum_{l=n}^k \sigma_l L_l, & \text{si } n \leq k \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.36)$$

De la même manière, nous pouvons calculer le flux sortant du domaine au point  $\vec{r}_K$  par l'équation suivante:

$$\phi_K(\vec{T}) = \phi_0(\vec{T}) e^{-\tau_{1,K}} + \sum_{l=1}^K q_l c_l e^{-\tau_{l+1,K}} \quad (2.37)$$

Soit  $\alpha$  la surface d'entrée de la ligne d'intégration  $\vec{T}$ , nous allons maintenant regrouper toutes les contributions, pour les segments pertinents à la région  $j$ , provenant des sources isotropes des autres régions  $i$  et du courant entrant par la surface  $\alpha$ :

$$\sum_k \delta_{j,N_k} L_k \bar{\phi}_k = J_{-,\alpha} H_{\alpha j}(\vec{T}) + \sum_i Q_i H_{ij}(\vec{T}) \quad (2.38)$$

et de façon similaire, nous pouvons regrouper les contributions pour le flux sortant  $\phi_K$  afin de réécrire l'équation (2.37) comme suit:

$$\phi_K = J_{-,\alpha} H_{\alpha j}(\vec{T}) + \sum_i Q_i H_{ij}(\vec{T}) \quad (2.39)$$

Dans les équations ci-dessus, les  $H$ s sont définies par:

$$H_{ij}(\vec{T}) = \delta_{ij} \sum_{k=1}^K \delta_{jN_k} d_k(\vec{T}) + \sum_{k=1}^K \sum_{l=1}^{k-1} \delta_{jN_k} \delta_{iN_l} c_l(\vec{T}) e^{-\tau_{l,k-1}} c_k(\vec{T}) \quad (2.40)$$

$$H_{\alpha j}(\vec{T}) = \delta_{\alpha N_0} \sum_{k=1}^K \delta_{jN_k} e^{-\tau_{1,k-1}} \quad (2.41)$$

$$H_{i\beta}(\vec{T}) = \sum_{k=1}^K \delta_{\beta N_{K+1}} \delta_{iN_k} c_k(\vec{T}) e^{-\tau_{k+1,k}} \quad (2.42)$$

$$H_{\alpha\beta}(\vec{T}) = \delta_{\alpha N_0} \delta_{\beta N_{K+1}} e^{-\tau_{1,K}} \quad (2.43)$$

Les équations (2.38)-(2.43) sont importantes pour prouver l'équivalence avec la méthode des probabilités de collision.

Les différentes probabilités, utilisées par la méthode des probabilités de collision dans une géométrie finie de trois dimensions, sont définies par (ROY R., 1998b):

$$p_{ij} = \frac{1}{4\pi V_j} \int_{V_i} d^3 r \int_{V_j} d^3 r' \frac{\exp(-\tau(\vec{r}', \vec{r}))}{|\vec{r}' - \vec{r}|^2} \quad (2.44)$$

$$p_{\alpha j} = \frac{1}{\pi S_\alpha} \int_{V_j} d^3 r \int_{S_\alpha} d^2 r'_S (\hat{\Omega} \cdot \hat{N}_-) \frac{\exp(-\tau(\vec{r}'_S, \vec{r}))}{|\vec{r}'_S - \vec{r}|^2} \quad (2.45)$$

$$P_{i\beta} = \frac{1}{4\pi V_i} \int_{S_\beta} d^2 r_S \int_{V_i} d^3 r' (\hat{\Omega} \cdot \hat{N}_+) \frac{\exp(-\tau(\vec{r}', \vec{r}_S))}{|\vec{r}' - \vec{r}_S|^2} \quad (2.46)$$

$$P_{\alpha\beta} = \frac{1}{\pi S_\beta} \int_{S_\beta} d^2 r_S \int_{S_\alpha} d^2 r'_S (\hat{\Omega} \cdot \hat{N}_+) (\hat{\Omega} \cdot \hat{N}_-) \frac{\exp(-\tau(\vec{r}'_S, \vec{r}_S))}{|\vec{r}'_S - \vec{r}_S|^2} \quad (2.47)$$

Si nous dénotons le parcours optique  $\tau(\vec{r}', \vec{r})$  en coordonnées locales  $s' \leq s$  de



chaque ligne d'intégration, après avoir effectué les changements de variable suivants:

$$d^3r d^3r' = d^4T ds ds' |\vec{r}' - \vec{r}|^2 \quad (2.48)$$

$$d^3r d^2r'_S = d^4T ds |\vec{r}'_S - \vec{r}|^2 \quad (2.49)$$

$$d^2r_S d^3r' = d^4T ds' |\vec{r}' - \vec{r}_S|^2 \quad (2.50)$$

$$d^2r_S d^2r'_S = d^4T |\vec{r}'_S - \vec{r}_S|^2 \quad (2.51)$$

les définitions de probabilités (2.44)-(2.47) deviennent:

$$p_{ij} = \frac{1}{4\pi V_j} \int_{\Gamma} d^4T \int_{s \in V_j} ds \int_{s' \in V_i} ds' e^{-\tau(s', s)} \quad (2.52)$$

$$p_{\alpha j} = \frac{1}{\pi S_{\alpha}} \int_{\Gamma} d^4T \chi_{\alpha}(\vec{T}, 0) \int_{s \in V_j} ds e^{-\tau(0, s)} \quad (2.53)$$

$$P_{i\beta} = \frac{1}{4\pi V_i} \int_{\Gamma} d^4T \chi_{\beta}(\vec{T}, s_K) \int_{s' \in V_i} ds' e^{-\tau(s', s_K)} \quad (2.54)$$

$$P_{\alpha\beta} = \frac{1}{\pi S_{\beta}} \int_{\Gamma} d^4T \chi_{\alpha}(\vec{T}, 0) \chi_{\beta}(\vec{T}, s_K) e^{-\tau(0, s_K)} \quad (2.55)$$

où  $\Gamma$  couvre l'espace de la variable angulaire  $4\pi$  et le plan perpendiculaire  $\pi_{\vec{\Omega}}$ . Il est ensuite relativement facile de montrer que les expressions analytiques (2.52)-(2.55) sont équivalentes aux expressions suivantes:

$$p_{ij} = \frac{1}{4\pi V_j} \int_{\Gamma} d^4T H_{ij}(\vec{T}) \quad (2.56)$$

$$p_{\alpha j} = \frac{1}{\pi S_{\alpha}} \int_{\Gamma} d^4T H_{\alpha j}(\vec{T}) \quad (2.57)$$

$$P_{i\beta} = \frac{1}{4\pi V_i} \int_{\Gamma} d^4T H_{i\beta}(\vec{T}) \quad (2.58)$$

$$P_{\alpha\beta} = \frac{1}{\pi S_{\beta}} \int_{\Gamma} d^4T H_{\alpha\beta}(\vec{T}) \quad (2.59)$$

Nous rappelons que, dans la méthode des caractéristiques, le flux intégré est défini

par:

$$V_J \Phi_J = \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} d^4T \sum_{k=1}^K \delta_{J,N_k} L_k \bar{\phi}_k(\vec{T}) \quad (2.60)$$

et le courant sortant est défini par:

$$J_{\alpha} = \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} d^4T \delta_{\alpha,N_{K+1}} \phi_K(\vec{T}) \quad (2.61)$$

Dans les équations ci-dessus,  $N_k$  est le numéro de la région où se trouve le segment  $k$  pour  $k = 1, 2, \dots, K$  comme défini dans la section 1.1. Afin de rendre les notations uniformes, nous utilisons  $N_{K+1}$  pour désigner le numéro de la surface où se trouve le point  $\vec{r}_K$ .

En utilisant les équations (2.38), (2.52) et (2.53), nous pouvons facilement obtenir une forme équivalente de l'équation (2.60):

$$V_J \Phi_J = \sum_{\alpha} J_{-, \alpha} p_{\alpha J} + \sum_i Q_i V_i p_{iJ} \quad (2.62)$$

De la même façon, en utilisant les équations (2.39), (2.54) et (2.55), nous pouvons obtenir une forme équivalente de l'équation (2.61):

$$J_{+, \beta} = \sum_{\alpha} J_{-, \alpha} P_{\alpha \beta} + \sum_i Q_i V_i P_{i \beta} \quad (2.63)$$

Les équations (2.62) et (2.63) construisent le système de base de la méthode des probabilités de collision. Ainsi, nous achevons la démonstration de l'équivalence, pour une géométrie finie de trois dimensions, entre la méthode des caractéristiques et la méthode des probabilités de collision.

## 2.6 Accélération de *Self-Collision Rebalancing*

Nous allons maintenant décrire la méthode d'accélération de SCR qui est basée sur l'équivalence prouvée ci-dessus. Comme dans la section précédente, nous utilisons la forme continue pour couvrir l'intégration sur l'espace angulaire-spatial  $\Gamma$ . Nous réécrivons l'équation (1.34) sur une ligne caractéristique  $\vec{T}$  en forme multigroupe:

$$\bar{\phi}_k^g(\vec{T}) = \left( \phi_{k-1}^g(\vec{T}) - \frac{Q_{N_k}^g}{\Sigma_{N_k}^g} \right) \frac{1 - e^{-\tau_k^g}}{\tau_k^g} + \frac{Q_{N_k}^g}{\Sigma_{N_k}^g} \quad (2.64)$$

Nous avons choisi d'utiliser les symboles originaux pour la source isotrope locale et la section efficace totale afin de rendre plus claire la description de la méthode SCR. En séparant la contribution de la source et celle du flux entrant dans l'équation ci-dessus, nous obtenons:

$$\tau_k^g \bar{\phi}_k^g(\vec{T}) = \phi_{k-1}^g(\vec{T})(1 - e^{-\tau_k^g}) + \frac{Q_{N_k}^g}{\Sigma_{N_k}^g}(-1 + \tau_k^g + e^{-\tau_k^g}) \quad (2.65)$$

En utilisant la formule (1.12), nous obtenons obtenir le taux de réaction total dans la région  $j$ :

$$\begin{aligned} \Sigma_j^g V_j \Phi_j^g &= \frac{\Sigma_j^g}{4\pi} \int_{\Gamma} d^4T \sum_k \delta_{j,N_k} L_k \bar{\phi}_k^g(\vec{T}) \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} d^4T \sum_k \delta_{j,N_k} \phi_{k-1}^g(\vec{T}) (1 - e^{-\tau_k^g}) \\ &\quad + \frac{Q_j^g}{4\pi \Sigma_j^g} \int_{\Gamma} d^4T \sum_k \delta_{j,N_k} (-1 + \tau_k^g + e^{-\tau_k^g}) \end{aligned} \quad (2.66)$$

sous une forme d'intégration continue sur l'espace  $\Gamma$ . Afin de simplifier l'écriture, nous introduisons les notations suivantes:

$$\Phi_{j,\text{in}}^g = \frac{1}{4\pi \Sigma_j^g V_j} \int_{\Gamma} d^4T \sum_k \delta_{j,N_k} \phi_{k-1}^g(\vec{T}) (1 - e^{-\tau_k^g}) \quad (2.67)$$

et

$$P_{jj}^g = \frac{1}{4\pi\Sigma_j^g V_j} \int_V d^4T \sum_k \delta_{j,N_k} \left( -1 + \tau_k^g + e^{-\tau_k^g} \right). \quad (2.68)$$

Remarquons que  $\Phi_{j,\text{in}}^g$  représente la contribution au flux moyen  $\Phi_j^g$  de toutes les régions à l'exclusion de la région  $j$  elle-même et que la quantité  $P_{jj}^g V_j Q_j^g$  représente la contribution de première collision de la source locale. Pour clarifier le rôle de la quantité  $P_{jj}^g$ , nous réécrivons l'équation (2.40) pour la quantité  $H_{jj}$  tout en supposant la convexité de la région  $j$ :

$$H_{jj}(\vec{T}) = d_{k_j}(\vec{T}) \quad (2.69)$$

$$= \frac{1}{(\Sigma_j^g)^2} \int_V d^4T \left( -1 + \tau_k^g + e^{-\tau_k^g} \right) \quad (2.70)$$

où  $k_j$  est l'indice de l'unique segment sur la ligne  $\vec{T}$  qui se trouve dans la région  $j$ . Ainsi, en considérant les équation (2.56) et (2.70), la quantité  $P_{jj}$ , définie dans l'équation (2.68), devient:

$$P_{jj}^g = \Sigma_j^g p_{jj}^g \quad (2.71)$$

qui n'est rien d'autre que la *probabilité de collision* de la région  $j$  à elle-même ("Self-Collision Probability"). Ainsi l'équation (2.66) devient:

$$\Sigma_j^g V_j \Phi_j^g = \Sigma_j^g V_j \Phi_{j,\text{in}}^g + P_{jj}^g V_j Q_j^g \quad (2.72)$$

Pour appliquer la méthode SCR dans l'itération interne  $l+1$ , nous construisons la

source de diffusion  $Q_j^{g,l}$  à partir du flux obtenu dans l'itération interne  $l$ :

$$Q_j^{g,l} = \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,j}^{g \leftarrow g'} \Phi_j^{g',l} + F_j^g \quad (2.73)$$

où  $F_j^g$  est la source de fission:

$$F_j^g = \chi^g F_j \quad (2.74)$$

qui est supposée constante dans une boucle interne. Ensuite, nous appliquons la méthode des caractéristiques en balayant toutes les lignes d'intégration et ceci nous conduit à l'équation suivante:

$$\Sigma_j^g V_j \Phi_j^{g,l+1/2} = \Sigma_j^g V_j \Phi_{j,\text{in}}^{g,l+1/2} + P_{jj}^g V_j Q_j^{g,l} \quad (2.75)$$

La méthode d'accélération SCR cherche, pour chaque région  $j$  dans le domaine, un nouveau flux  $\Phi_j^{g,l+1}$  qui va satisfaire l'équation (2.75) pour la nouvelle source de diffusion  $Q_j^{g,l+1}$ , ce qui conduit à l'équation suivante:

$$\sum_{g'=1}^G \left( \Sigma_j^g \delta_{gg'} - P_{jj}^g \Sigma_{s,j}^{g \leftarrow g'} \right) \Phi_j^{g',l+1} = \Sigma_j^g \Phi_{j,\text{in}}^{g,l+1/2} + P_{jj}^g F_j^g \quad (2.76)$$

Remarquons que la quantité  $\Phi_{j,\text{in}}^{g,l+1/2}$  est maintenue constante de l'équation (2.75) à l'équation (2.76) dans notre méthode de SCR. L'équation (2.76) est résolue en utilisant la méthode itérative de Gauss-Seidel. Il n'est pas toujours nécessaire de faire converger la solution de (2.76) et ceci surtout pour les premières itérations du calcul. Le nombre maximal d'itérations pour résoudre l'équation (2.76) est donc limité à 5 comme valeur de défaut.

Il nous reste maintenant à évaluer le courant sortant afin de fournir un courant

entrant adéquat, par rapport à la méthode SCR, pour la condition de réflexion. À partir de (1.33) et de (1.55), nous pouvons facilement calculer le courant sortant par:

$$\begin{aligned}
 J_{\tau,\alpha}^{g,l+1/2} &= \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} d^4T \chi_{\alpha}(\vec{r}_K) \phi_K^{g,l+1/2}(\vec{T}) \\
 &= \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} d^4T \chi_{\alpha}(\vec{r}_K) \left( \phi_{K-1}^{g,l+1/2}(\vec{T}) e^{-\tau_K^g} + \frac{Q_{N_K}^{g,l+1/2}}{\Sigma_{N_K}^g} (1 - e^{-\tau_K^g}) \right) \\
 &= \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} d^4T \chi_{\alpha}(\vec{r}_K) \phi_{K-1}^{g,l+1/2}(\vec{T}) e^{-\tau_K^g} \\
 &\quad + \frac{Q_{j_{\alpha}}^{g,l+1/2}}{4\pi \Sigma_{j_{\alpha}}^g} \int_{\Gamma} d^4T \chi_{\alpha}(\vec{r}_K) (1 - e^{-\tau_K^g}) \\
 &= J_{0,\alpha}^{g,l+1/2} + P_{j_{\alpha},\alpha}^g V_{j_{\alpha}} Q_{j_{\alpha}}^{g,l+1/2}
 \end{aligned} \tag{2.77}$$

Dans l'équation ci-dessus, nous avons utilisé deux nouvelles quantités qui sont définies par:

$$J_{0,\alpha}^{g,l+1/2} = \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} d^4T \chi_{\alpha}(\vec{r}_K) \phi_{K-1}^{g,l+1/2}(\vec{T}) e^{-\tau_K^g} \tag{2.78}$$

et

$$P_{j_{\alpha},\alpha}^g = \frac{1}{4\pi \Sigma_{j_{\alpha}}^g V_{j_{\alpha}}} \int_{\Gamma} d^4T \chi_{\alpha}(\vec{r}_K) (1 - e^{-\tau_K^g}) \tag{2.79}$$

Dans les équations ci-dessus,  $\vec{T}$  est une ligne d'intégration qui sort le domaine par la surface  $\alpha$  et  $j_{\alpha}$  est la dernière région rencontrée par la ligne  $\vec{T}$ . Il est évident que l'indice  $j_{\alpha}$  est unique pour toutes les lignes  $\vec{T}$  qui sortent par la surface  $\alpha$ .

Supposons que la région  $j_{\alpha}$  est convexe, la somme dans l'équation (2.42) se réduit

à un seul terme:

$$H_{j,\alpha} = c_K(\vec{T}) = \frac{1 - e^{-r_K^g}}{\Sigma_{j,\alpha}^g} \quad (2.80)$$

En considérant les équations (2.58) et (2.80), la quantité  $P_{j,\alpha}^{g,l+1/2}$ , définie dans l'équation (2.79), est donc la *probabilité de fuite* de la région  $j_\alpha$  envers la surface  $\alpha$ .

Dans la procédure SCR, quand le flux  $\Phi_j^{g,l+1}$  est obtenu par (2.76), il est ensuite utilisé pour substituer le flux  $\Phi_j^{g,l}$  dans (2.73) afin de construire la nouvelle source  $Q_{j,\alpha}^{g,l+1}$  dans les régions de bord, et cette dernière est utilisée pour ajuster le courant sortant par l'équation suivante:

$$J_{\alpha,\alpha}^{g,l+1} = J_{0,\alpha}^{g,l+1/2} + P_{j,\alpha}^g V_{j,\alpha} Q_{j,\alpha}^{g,l+1} \quad (2.81)$$

Le courant entrant sera évalué à partir du courant sortant  $J_{\alpha,\alpha}^{g,l+1}$  pour la prochaine itération.

## 2.7 Autres techniques utilisées

### Tables des exponentielles

L'évaluation exacte de la fonction exponentielle est très coûteuse pour la méthode des caractéristiques. Comme nous avons déjà vu dans le deuxième chapitre, il y a un balayage complet des lignes d'intégration à chaque itération interne. Sur chaque ligne d'intégration, il y a  $G_u$  fois d'évaluations exponentielles par segment où  $G_u$  étant le nombre de groupes d'énergie non convergés. Plus la géométrie est complexe, plus les lignes d'intégration sont nombreuses pour avoir une précision adéquate. Plus les lignes sont nombreuses, plus le calcul des exponentiels est lourd. Il nous faut donc une évaluation d'exponentielle qui est à la fois rapide et précise.

Tableau 2.1 Erreur absolue sur les approches d'exponentielle

$X_{\max}$	1.0	3.0	7.5	15.5
Rationnelle	0.31E-4	0.10E-3	0.17E-2	0.35E-2
Interpolation	0.54E-6	0.54E-6	0.54E-6	0.54E-6

Il y a deux approches qui sont utilisées dans le domaine de calcul neutronique: approximation par une expression rationnelle et approximation par l'interpolation des valeurs d'exponentielle précalculées. Il s'avère que l'expression rationnelle suivante, déjà employée pour les calculs de type SN (CHILDS R. L. and RHOADES W. A., 1993), est une approximation adéquate pour les calculs du transport:

$$e^{-x} \approx \frac{181.2 - 51.42x + 4.04x^2}{181.2 + 129.78x + 43.22x^2 + 8.53x^3 + x^4} \quad (2.82)$$

Dans le solveur CACTUS du code WIMS8, la fonction exponentielle  $e^{-x}$  est évaluée par une interpolation des valeurs d'exponentiel précalculées sur l'intervalle de 0.0 à 15.5 au pas de 1/512.

Nous avons effectué une série de calculs exponentiels afin de comparer ces deux approches. Nous constatons que l'approche rationnelle apporte un gain environ de 15% sur le temps de calcul tandis que l'approche d'interpolation en apporte 25%. Nous avons aussi tablé dans Table 2.1 les erreurs absolues pour ces deux approches sur différents intervalles de  $x$ . Nous remarquons que l'approche d'interpolation offre une meilleure précision que l'approche rationnelle sur un intervalle élargi. Nous choisissons donc, pour l'approximation de la fonction exponentielle, l'interpolation des valeurs précalculées décrite ci-dessus. Dans le chapitre 4, nous allons voir que les résultats numériques valident notre choix.



### **Nombre limité d'itérations internes**

Il est bien connu qu'il n'est pas nécessaire de faire converger la boucle interne pour les premières itérations externes. L'exigence de convergence peut être relâchée de deux façons: soit utiliser une précision réduite pour la critère de convergence dans les boucles internes, soit limiter le nombre maximal d'itérations dans les boucles internes. Nous avons choisi la deuxième approche: le nombre maximal d'itérations internes correspond à l'itération externe  $n_e$  est fixé par défaut à  $n_e$ . Ainsi, plus la boucle externe avance, plus d'itérations internes sont disponibles pour atteindre la convergence interne exigée. La procédure itérative finira par atteindre la précision demandée.

## CHAPITRE 3

### PARALLÉLISATION

#### 3.1 Introduction

D'un côté, avec le progrès continu que l'on connaît en informatique, surtout dans le domaine du *hardware*, il est maintenant possible de faire des calculs de plus en plus volumineux. D'un autre côté, le modèle devient aussi de plus en plus complexe et l'exigence sur la performance des matériels croît en conséquence même encore plus rapidement. Le calcul parallèle peut alors fournir une performance supplémentaire en répartissant une tâche complexe sur plusieurs processeurs.

Il existe deux standards pour implanter un programme en parallèle, soient le MPI (*Message Passing Interface*) et le PVM (*Parallel Virtual Machine*). Grâce au concept de machine virtuelle, le PVM est plus avantageux quand l'application est exécutée sur une collection de stations dans le réseau, plus particulièrement si les machines sont hétérogènes. En plus, le PVM contient des fonctions qui sont importantes pour créer des applications portables sur des MPPs (*Massively Parallel Processor*) et des grappes de stations de travail (GEIST G. A. and PAPADOPOULOS P. M., 1986). Nous avons donc choisi le PVM pour paralléliser le module de la méthode des caractéristiques MCI.

Les stratégies de parallélisation par groupe et par région ont déjà été étudiées pour la méthode des probabilités de collision (QADDOURI A. et al., 1996; QADDOURI A. et al., 1995). Les inconvénients de ces stratégies reposent sur la limite d'évolutivité ("*scalability*") et la difficulté d'avoir un bon équilibre de la répartition de charge. Il a été démontré qu'il est difficile d'effectuer un calcul sur

un nombre quelconque de processeurs tout en gardant une répartition de charge relativement équilibrée. Nous allons discuter de deux stratégies dans ce chapitre: la parallélisation par lignes et la parallélisation par macrobandes. Comme nous allons montrer dans le chapitre des résultats, ces deux stratégies sont plus flexibles envers l'évolutivité ("*scalability*") et l'équilibre de charge.

Nous avons à notre disposition une grappe de stations de type Pentium-450 interconnectés par un réseau local de type Ethernet. La parallélisation du module MCI a donc été conçue, réalisée et testée dans cet environnement contraignant.

### **3.2 Conception de la parallélisation par lignes**

Il existe plusieurs façons pour paralléliser la résolution de l'équation du transport neutronique, notamment les parallélisations en décomposant le domaine par angle, en espace et par groupe d'énergie. Basé sur la méthode des caractéristiques décrite dans les chapitres précédents, le module MCI résout l'équation du transport en répétant le même procédure de calcul sur toutes les lignes d'intégration, il est donc plus naturel de le paralléliser par des lignes d'intégration. C'est le niveau de granularité le plus faible où il est possible de répartir la solution.

Dans les sections prochaines, nous allons d'abord examiner le temps de calcul sur une ligne d'intégration suivi par le temps de communication. Nous montrerons ensuite les différentes options disponibles dans le module MCI pour la répartition de charge. Il faut bien voir que toutes les techniques discutées ci-après s'appliquent aussi bien sur les lignes originales que sur les lignes fusionnées.

### 3.2.1 Temps de calcul sur une ligne d'intégration

Nous reprenons les notations de la section 1.2. soit  $\vec{T}$  une ligne d'intégration dans une direction donnée  $\hat{\Omega}$ , soit  $\vec{r}_0, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_K$  les points d'intersection de  $\vec{T}$  avec les interfaces de régions. les formules pour calculer le flux sortant et le flux moyen d'un segment, soient les formules 1.33 et 1.34, ont été programmées en favorisant l'efficacité du calcul séquentiel. Avant d'estimer le temps de calcul sur une ligne d'intégration, nous nous devons donc expliquer l'algorithme séquentiel des calculs sur une ligne.

D'abord, pour minimiser la taille du fichier des lignes d'intégration et pour réduire le nombre d'accès en lecture du disque dur, nous utilisons une seule ligne pour effectuer le calcul dans la direction de la ligne  $\hat{\Omega}$  et dans la direction opposée  $-\hat{\Omega}$ . Nous faisons un balayage ("*sweep*") des lignes dans chaque itération interne. Sur chaque ligne, nous calculons d'abord dans la direction  $\hat{\Omega}$  et, ensuite, nous calculons dans la direction opposée  $-\hat{\Omega}$ , avant de passer à la ligne suivante. Comme le calcul le plus coûteux sur un segment est celui de la fonction exponentielle, ainsi sur chaque ligne d'intégration, la valeur de l'expression  $(1 - e^{-\tau_k})$  est évaluée une seule fois pour chaque segment lors du calcul dans la direction  $\hat{\Omega}$  et, ensuite, elle est conservée dans un vecteur temporaire. Ainsi elle peut être immédiatement réutilisée dans le calcul de la direction opposée  $-\hat{\Omega}$  sans avoir à être réévaluée.

Dans l'implantation du module MCI, nous utilisons une variante des formules 1.48 et 1.53 pour calculer le flux scalaire d'une région et nous utilisons aussi une variante de la formule 1.55 pour calculer le courant sortant d'une surface. En tenant compte des formules 1.48 et 1.52, l'équation 1.53 peut être simplifiée pour donner l'équation

suivante:

$$\Phi_j = -\frac{1}{4\pi\Sigma_j V_j} \sum_{i,n} \omega_i p_{i,n} \sum_k \delta_{j,N_k} \Delta\phi_k + \frac{Q_j}{\Sigma_j} \quad (3.1)$$

où  $\Delta\phi_k = \phi_k - \phi_{k-1}$  est défini par la formule 1.35. Le produit  $\omega_i p_{i,n}$  caractérise le poids d'une ligne et est entièrement sauvegardé avec d'autres caractéristiques de la ligne dans un fichier binaire à accès séquentiel, spécifié par SEQ\_BINARY dans DRAGON. Nous introduisons la notation  $w_T$ .

$$w_T = \omega_i p_{i,n} \quad (3.2)$$

pour exprimer le fait qu'il n'y a pas de calcul répétitif pour la quantité  $w_T$  qui est connue comme le poids de la ligne  $\vec{T}$  dans le code DRAGON.

En sachant la valeur  $\phi_{k-1} w_T$ , les formules réellement utilisées dans le module MCI sont les suivantes:

$$((\Delta_k w_T)) = ((\phi_{k-1} w_T)) - \frac{q_k}{\sigma_k} w_T. \quad (3.3)$$

$$\Phi_j = \Phi_j - (((\Delta_k w_T))((1 - e^{-\tau_k}))). \quad (3.4)$$

$$((\phi_k w_T)) = \phi_{k-1} + (((\Delta_k w_T))((1 - e^{-\tau_k}))). \quad (3.5)$$

Les formules ci-dessus décrivent plutôt les opérations informatiques dans le programme mais pas des formules purement mathématiques. Par exemple, la deuxième formule signifie la soustraction de la quantité  $((\Delta_k w_T))((1 - e^{-\tau_k}))$  de la variable  $\Phi_j$ . Les expressions entre doubles parenthèses sont évaluées une seule fois. Comme l'évaluation de la fonction exponentielle est très coûteuse, nous tenons à conserver la valeur de l'expression  $((1 - e^{-\tau_k}))$  pour le calcul dans la direction inverse. Nous utilisons  $\Delta_k$  au lieu de  $\Delta\phi_k$  dans le module MCI, car la contribution de la source, représentée par le dernier terme dans l'équation 3.1, est ajouté seulement à la fin

Tableau 3.1 Nombre d'opérations sur un segment dans deux directions

expression	multiplication	addition	exponentielle
$((1 - e^{-\tau_k}))$	1	1	1
$((\Delta_k w_T))$	2	2	0
$\Phi_j$	2	2	0
$((\phi_k w_T))$	0	2	0
Total	5	7	1

du balayage des lignes. Nous faisons aussi la remarque que, dans le module MCI, la source  $q_k = Q_j$  est utilisée sous la forme réduite

$$\frac{q_k}{\sigma_k} = \frac{Q_j}{\Sigma_j}. \quad (3.6)$$

Sans oublier la multiplication dans la variable  $\tau_k$ , le nombre d'opérations sur un segment dans les deux directions peut être décompté et est donné dans le tableau 3.1.

Pour débiter le calcul sur une ligne dans une direction, il faut calculer le flux angulaire entrant au point  $\tilde{r}_0$  à partir du courant entrant. Pour terminer le calcul sur une ligne dans une direction, il faut enregistrer le flux angulaire sortant dans le courant sortant correspondant de la surface appropriée. Pour ce faire, il faut une multiplication pour calculer le flux entrant et une addition pour stocker le flux sortant. Ainsi, le temps de calcul sur une ligne d'intégration de  $K$  segments peut être exprimé par:

$$t_T = 2t_x + 2t_+ + K(5t_x + 7t_+ + t_e), \quad (3.7)$$

où  $t_x$ ,  $t_+$  et  $t_e$  correspondent au temps de calcul d'une multiplication, au temps de calcul d'une addition et au temps de calcul d'une évaluation de la fonction exponentielle respectivement.

Comme l'évaluation de la fonction exponentielle est décidément plus complexe et plus coûteuse qu'une simple multiplication ou addition ( $t_e \approx t_+$ ), nous pouvons dire que le temps de calcul sur une ligne d'intégration est une fonction linéaire, ou presque linéaire par rapport au nombre de segments dans cette ligne.

### 3.2.2 Temps de communication

Le temps de calcul d'un programme parallèle peut être composé en deux parties. Une partie rassemble le temps de calcul sur le processeur le plus lent et une autre partie concerne plutôt le temps de communication interprocesseurs. Le temps de communication dépend de la taille du message, de l'infrastructure de l'interconnexion des processeurs et du mode de transfert. Comme première approximation pour le temps de communication de  $n$  mots, nous pouvons utiliser:

$$t_{\text{comm}} = t_{\text{départ}} + nt_{\text{donnée}} \quad (3.8)$$

où  $t_{\text{départ}}$  et  $t_{\text{donnée}}$  sont respectivement le temps de démarrage d'une transmission de donnée et le temps de transmission d'une unité de mot (donnée). Le temps de démarrage caractérise essentiellement le temps pour envoyer un message sans données. Il comprend normalement le temps d'emballage et le temps de déballage d'un message. Le temps de démarrage et le temps de transmission d'un mot de donnée sont souvent considérés comme des constantes. Les valeurs typiques de  $t_{\text{départ}}$  et de  $t_{\text{donnée}}$  (WILKINSON B. and ALLEN M., 1999) sont données dans le tableau 3.2 en nanosecondes (ns) et en nombre d'opérations arithmétiques (*flops: FLoat OPerationS*). Nous remarquons que  $t_{\text{donnée}}$  est souvent beaucoup plus grand que le temps pour faire une simple opération arithmétique et que  $t_{\text{départ}}$  est considérablement plus grand que  $t_{\text{donnée}}$ . Par conséquent, dans le cadre du calcul parallèle, nous préférons répéter certains calculs sur chaque processeur plutôt que

Tableau 3.2 Paramètres typiques pour le temps de communication

Type d'ordinateur	$t_{\text{départ}}$	$t_{\text{donnée}}$
Cray T3D (PVM)	3000 ns / 273 flops	63 ns / 6 flops
IBM SP-2 (MPI)	35000 ns / 8333 flops	230 ns / 55 flops

d'envoyer fréquemment des messages de trop petite taille.

Au niveau atomique des ressources parallèles, il pourrait y avoir un processeur par ligne d'intégration. Dans ce cas, pour un processeur  $P_f$  qui prend en charge la ligne  $\vec{T}$  de  $K$  segments, seulement le flux dans les régions traversées par la ligne serait communiqué en accompagnement du numéro de région correspondant. Nous obtenons donc le temps de communication pour le processeur  $P_f$  suivant :

$$t_{\text{comm}, P_f} = t_{\text{départ}} + 2K t_{\text{donnée}}. \quad (3.9)$$

Nous n'utilisons jamais cette approche à la limite d'évolutivité pour les deux raisons suivantes. Premièrement, le nombre de lignes est souvent très élevé, de l'ordre  $10^4 \sim 10^6$ , nous ne pourrions que rarement disposer d'autant de processeurs dans un réseau dédié. Deuxièmement, même si nous disposions d'un tel réseau, comme le temps de démarrage et le temps de transmission sont grands par rapport au nombre de segments, le temps de communication pourrait être comparable au temps de calcul sur la ligne. Nous perdons ainsi toute performance escomptée d'un traitement parallèle.

Pour les calculs réalistes, le nombre de lignes,  $N_T$ , est toujours très élevé par rapport au nombre de processeurs,  $N_P$ , disponibles dans le réseau parallèle. Les lignes sont regroupées en lot et chaque processeur prend charge d'un lot. Les stratégies utilisées pour le regroupement des lignes seront présentées dans la section 3.2.3. Dans la plupart des cas, nous disposons d'un nombre limité de processeurs, jusqu'à



quelque centaines pour certains grands laboratoires de simulation, nous pouvons supposer qu'un lot de lignes traverse la plupart des régions sinon presque toutes les régions. Dans ce cas, nous préférons communiquer le flux sur toutes les régions au lieu de communiquer seulement le flux sur les régions traversées accompagné par leur numérotation. Une telle approche conduit à une simplification sur la programmation et, aussi, dans la plupart de cas, elle présente une économie sur le temps de communication.

Dans la conception et la réalisation du module MCI, le flux angulaire calculé dans un processeur, donc une portion du flux scalaire, est diffusé à tous les autres processeurs. Le flux scalaire est reconstruit sur chaque processeur avant de commencer la prochaine itération. C'est un processus de communication à tous ("*multicasting*") dont le temps de communication pour une itération est le suivant:

$$t_{\text{comm}} = .N_P(.N_P - 1)(t_{\text{départ}} + .N_R t_{\text{donnée}}) \quad (3.10)$$

où  $.N_P$  et  $.N_R$  sont respectivement le nombre de processeurs et le nombre de régions. Nous remarquons que le temps de communication ci-dessus est une fonction quadratique du nombre de processeurs engagés dans le calcul. Ceci nous mène à la réflexion suivante: plus les processeurs seront nombreux, plus le facteur d'accélération ("*speedup*") déviara du nombre de processeurs. C'est ce que nous allons démontrer dans le chapitre des résultats. Toute la discussion ci-dessus est basée sur un problème mono-énergique. Pour un problème multigroupe, nous n'avons qu'à remplacer la variable  $.N_R$  dans l'équation 3.10 par le produit  $.N_R G$ , où  $G$  correspond au nombre de groupes d'énergie.

### 3.2.3 Répartition de la charge

L'idée de calcul parallèle est de faire travailler plusieurs processeurs sur un seul calcul en même temps. Les processeurs fonctionnent en parallèle et en collaboration, chacun prenant charge d'une partie du calcul. Un processeur en attente ("*busy wait*") représente une perte de performance pour l'algorithme de calcul parallèle. Pour atteindre sa performance maximale, une répartition de charge ("*load balancing*") équilibrée entre les processeurs est cruciale dans un algorithme de calcul parallèle. Il y a deux catégories de stratégie pour la répartition de charge: la répartition statique et la répartition dynamique. Une stratégie dynamique répartit la charge sur chaque processeur et ajuste le chargement au fur et à mesure selon l'évolution du calcul. La stratégie dynamique est indispensable pour un calcul dont l'évolution est imprévisible, par exemple un algorithme de tri en parallèle. Par contre, la charge pour la méthode des caractéristiques est relativement stable par rapport à l'évolution du calcul, une répartition statique s'avère donc suffisante pour le module MCI.

Comme nous l'avons déjà mentionné, le nombre de lignes d'intégration est toujours très élevé par rapport au nombre de processeurs à notre disposition, nous nous contentons donc de distribuer à chaque processeur un sous-ensemble de lignes, disons  $L_p$  lignes pour le processeur  $p$ . En considérant le temps de calcul sur une ligne donnée par l'équation 3.7, nous obtenons la charge sur un processeur:

$$t_p = L_p(2t_{\times} + 2t_{+}) + L_p S_p(5t_{\times} + 7t_{+} + t_e). \quad (3.11)$$

$S_p$  étant le nombre moyen de segments par ligne de toutes les  $L_p$  lignes du processeur  $p$ . Il y a plusieurs manières pour répartir la charge. Dans le module MCI, trois options sont disponibles pour la parallélisation par lignes: SPLT, STRD et ANGL.

La logique de l'option SPLT est la plus simple des trois. Comme le temps de calcul pour la méthode des caractéristiques est directement lié au nombre de lignes d'intégration utilisées, l'option SPLT propose de diviser les lignes en faisceau. Le premier faisceau est constitué des premiers  $N_T/N_P$  lignes générées par EXCELT et le deuxième faisceau est constitué des  $N_T/N_P$  lignes suivantes et ainsi de suite. Chaque processeur calcule sur un faisceau qui lui est distribué.

Dans la plupart des cas, l'option SPLT fonctionne très bien. Mais imaginons une géométrie où il y a beaucoup de petites régions au centre. Dans le pire des cas, si nous avons mal choisi le nombre de processeurs  $N_P$ , il peut y avoir un faisceau dont le nombre moyen des segments  $S_p$  est beaucoup plus élevé que celui d'un autre faisceau. Dans ce cas, les processeurs seront mal équilibrés et nous allons constater une dégradation de performance, car le temps de calcul sur une ligne est une fonction linéaire du nombre de segments qu'elle contient. Afin de mieux équilibrer la charge dans une telle situation, nous pourrions recourir à l'option STRD qui consiste à choisir des lignes à une intervalle constante. Dans cette option, le premier processeur prend les lignes de numéro  $1, 1 + N_P, 1 + 2N_P, \dots$  alors que le deuxième processeur prend les lignes de numéro  $2, 2 + N_P, 2 + 2N_P, \dots$  et ainsi de suite. Avec cette option, il est statistiquement improbable d'avoir deux sous-ensembles de lignes dont le nombre moyen des segments par ligne de l'un soit beaucoup plus élevé par rapport à celui de l'autre.

La troisième option, ANGL, est implantée seulement pour simuler un algorithme parallèle par angle. Le nombre de processeurs est égal au nombre d'angles utilisées. Chaque processeur s'attribue un angle particulier et calcule sur toutes lignes dans cette angle. L'inconvénient de cette stratégie est la contrainte sur le nombre de processeurs. Si nous disposons de cinq processeurs, alors nous aurons à faire un calcul avec six directions, il y aura alors un processeur qui sera doublement chargé par rapport aux quatre autres. Dans le cas où il y aurait trois directions, deux

processeurs ne seraient pas utilisés.

Nous voulons signaler que, dans l'implantation du module MCI, ce n'est pas un processeur "maître" qui sépare les lignes et les distribue aux processeurs "esclaves". car ceci se traduirait par une augmentation du temps de communication. En fait, chaque processeur fait appel au module EXCELT pour générer toutes les lignes, les divise en sous-ensembles selon une des trois options présentées auparavant et choisit le sous-ensemble qui lui appartient. Cette approche est réalisable grâce au numéro d'identification de processeur dans le contexte DRAGON (voir la variable `me` dans la section 3.4).

### 3.3 Conception de la parallélisation par macrobandes

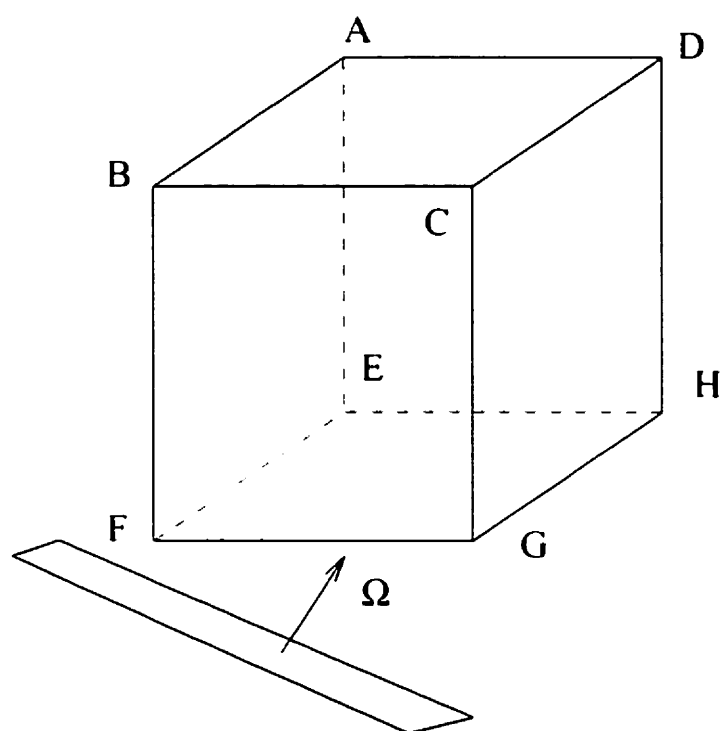
Nous avons parlé du fusionnement des lignes dans la section 2.4, nous allons maintenant élargir ce concept en introduisant la notion de macrobande. Une **macrobande** d'une géométrie est un couple formé d'un volume géométrique  $M$  et d'un angle  $\hat{\Omega}$  qui satisfont la condition suivante: pour toute ligne  $\vec{T}$  dans la direction  $\hat{\Omega}$ , soit elle n'a pas de points d'intersection avec  $M$ , soit elle rencontre toujours les mêmes régions dans le même ordre peu importe par où elle traverse la macrobande.

#### 3.3.1 Illustrations des macrobandes dans deux géométries simples

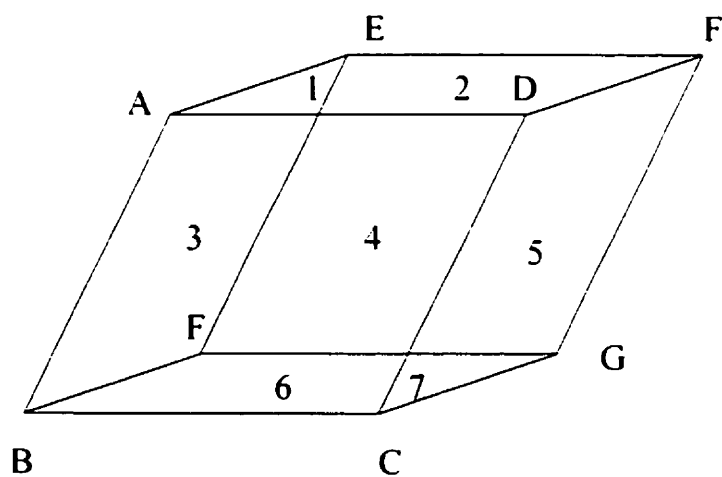
Pour mieux illustrer de quoi a l'air une macrobande, nous allons analyser deux situations, une très simple et une autre plus complexe. Soit ABCD-EFGH un cube,  $\hat{\Omega}$  une direction donnée et  $\pi_{\hat{\Omega}}$  un plan perpendiculaire à la direction  $\hat{\Omega}$  comme illustré dans la figure 3.1(a). Nous projetons chaque surface du cube sur le plan  $\pi_{\hat{\Omega}}$  et nous les superposons les unes sur les autres. Les lignes parallèles restent parallèles dans leur projection, nous obtenons ainsi une superposition de six parallélogrammes.

Nous avons sept zones disjointes dans la projection qui sont illustrées dans la figure 3.1(b) et chacune correspond à une macrobande. Les macrobandes sont numérotées de 1 à 7 et c'est leur position qui détermine leurs propriétés. Par exemple, la macrobande numéro 1 se trouve dans l'intersection de la projection des surfaces ADHE et ABFE. Par conséquent, une ligne d'intégration dans la direction  $\hat{\Omega}$  traverse nécessairement la surface ADHE et la surface ABFE du cube si son point de départ se trouve dans la zone numéro 1. Nous remarquons facilement que la section des macrobandes n'est pas toujours la même.

Nous analysons maintenant un cube avec un cylindre vertical au milieu. Le cube est sectionné par deux interfaces croisées à l'axe du cylindre comme illustré dans la figure 3.2(a). En plus de projeter les surfaces du cube, nous projetons aussi les interfaces de cette géométrie sur le plan  $\pi_{\hat{\Omega}}$ . La projection d'un cercle est une ellipse. La projection de chaque surface ou interface est superposée l'une sur l'autre. L'interprétation de la figure 3.2(b) reste le même mais avec une complexité plus importante. Pour donner un exemple, nous considérons une ligne d'intégration dans la direction  $\hat{\Omega}$  dont le point de départ est le point X dans la figure 3.2(b). Le point d'entrée de la ligne se trouve dans le petit carré gauche inférieur de la surface EFGH à l'extérieur du cercle en bas; le point sorti se trouve dans l'intersection du cercle en haut avec le petit carré droit supérieur dans la surface ABCD. En portant attention aux projections des différentes interfaces, nous pouvons repérer toutes les régions traversées par cette ligne. La figure 3.2(b) est déjà très complexe, il nous est difficile d'illustrer chaque interface avec identification. Nous indiquons tout simplement que la ligne considérée rencontre trois interfaces et par conséquent traverse quatre régions. Nous remarquons tout de suite que la section varie d'une façon substantielle d'une macrobande à l'autre d'où l'intérêt de générer les lignes d'intégration de façon non uniforme.

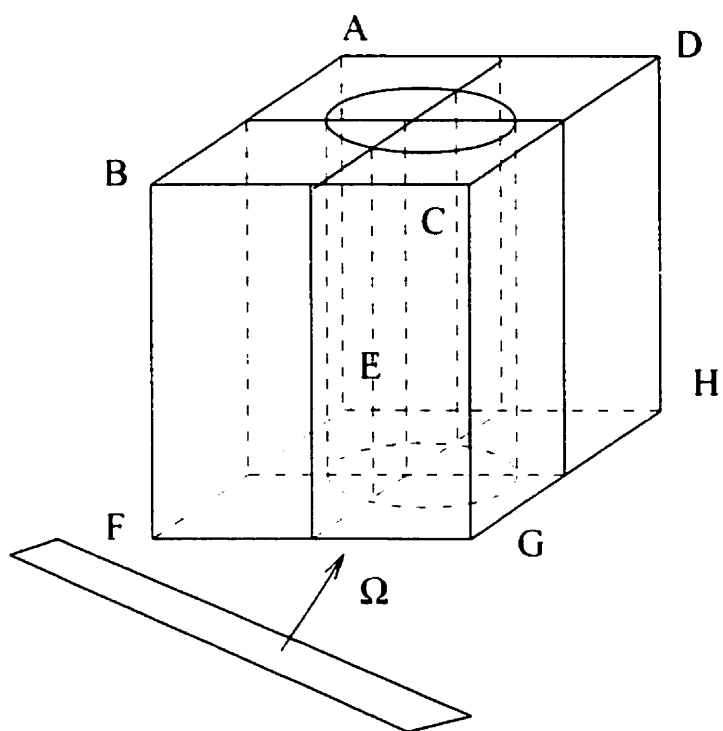


(a) Cube simple

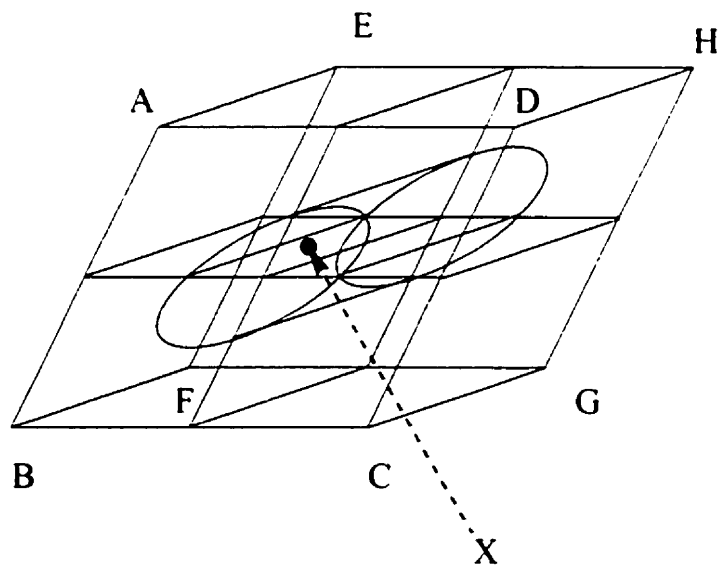


(b) Projection du cube simple

Figure 3.1 Les macrobandes d'une cube pour une direction  $\hat{\Omega}$  donnée.



(a) Cube avec cylindre



(b) Projection de la cube avec cylindre

Figure 3.2 Les macrobandes d'une cube avec cylindre pour une direction  $\hat{\Omega}$  donnée

### 3.3.2 Réalisation des macrobandes

Si l'idée des macrobandes est simple, sa réalisation ne l'est pourtant pas. Nous avons développé une technique qui consiste à ajouter une vue de macrobandes aux lignes uniformément générées par le module EXCELT en les triant comme nous l'avons fait pour le fusionnement des lignes au deuxième niveau (voir section 2.4). C'est ainsi que la technique des macrobandes est actuellement programmée dans le module MCI. Toutefois, cette implantation n'élimine pas les problèmes reliés au goulot d'étranglement et du manque de mémoire rencontrés par la technique de fusionnement au deuxième niveau. Une autre approche permettrait probablement de résoudre ces problèmes, à condition qu'elle soit développée dans un autre module qui remplacerait l'actuel module EXCELT et qui générerait les lignes d'intégration dans l'environnement des macrobandes. Il s'agirait d'analyser analytiquement les macrobandes pour une géométrie donnée et de générer les lignes au besoins. Pour ce faire, il faudrait numéroter les macrobandes et les caractériser. Quand il n'y a pas de cylindre dans la géométrie, c'est plus facile à développer, car il y a seulement trois catégories de lignes à considérer sur le plan perpendiculaire et chacune d'elles correspond à une direction d'axe de la géométrie à trois dimensions. Le problème devient plus complexe quand les cylindres interviennent et, encore plus complexe quand il s'agit de cylindres imbriqués qui sont couramment utilisés dans le calcul supercellule pour un réacteur CANDU. La technique du tri des lignes est donc celle que nous avons réalisé compte tenu de l'effort de programmation nécessaire au reformatage d'EXCELT.

Une fois l'information de toutes les macrobandes connue, nous pouvons procéder pour générer les lignes d'intégration. Deux stratégies sont possibles. La première est en fait une sélection des lignes uniformément générés. Nous prendrons le même point de référence dans le plan perpendiculaire qu'une procédure de tracking uniforme et nous produirons tous les points de départ à une distance constante dans



les deux directions de la base choisie du plan. Pour chaque zone de macrobande, nous choisissons un ou plusieurs points parmi tous les points qui se trouvent à l'intérieur de cette zone. Pour une certaine densité de lignes, le point de départ de toutes les lignes dans la direction  $\hat{\Omega}$  utilisées par le module EXCELT pour la géométrie de la figure 3.1(a) est illustré par un point noir dans la figure 3.3. Nous utilisons une ligne pour chaque macrobande et nous pourrions, par exemple, choisir le point le plus centré dans chaque macrobande sans spécifier le sens du centre. Les points noirs superposés par une croix sont des points de départ choisis pour générer des lignes d'intégration dans des macrobandes.

L'avantage de cette approche est sa compatibilité avec la procédure classique, car toutes les lignes forment un sous-ensemble des lignes uniformément générées. Pourtant cette approche a quelques inconvénients. En fait, un ensemble de lignes uniformément générées est considéré valide si toutes les régions sont couvertes par celui-ci. Si nous ajoutions les points de départ utilisés par EXCELT dans la figure 3.2(b), la figure deviendrait invisible. Mais nous pouvons imaginer un ensemble de lignes dans la direction  $\hat{\Omega}$  qui couvre toutes les régions pour lesquelles une ou plusieurs macrobande(s) miniature(s) s'est ou se sont glissée(s) entre les lignes. Cela représente un inconvénient. En effet, bien qu'il y ait des macrobandes non couvertes, l'ensemble des lignes est considéré valide car toutes les régions sont couvertes. Un deuxième inconvénient, c'est que même pour une macrobande couverte par une ligne, la ligne utilisée n'est pas toujours une bonne candidate pour la macrobande en question. Par exemple, dans le cas de la macrobande 7 dans la figure 3.3, la ligne d'intégration est trop proche de la frontière de la macrobande pour représenter correctement la macrobande 7.

La deuxième méthode permet de couvrir toutes les macrobandes mais introduit l'incompatibilité avec la procédure classique. Il s'agit de considérer chaque macrobande comme une géométrie complète et de générer des lignes de façon indépendante

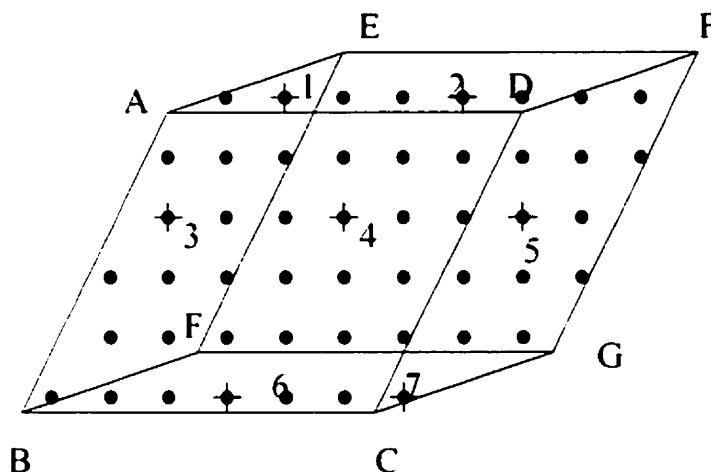


Figure 3.3 Génération des lignes pour des macrobandes dans la direction  $\hat{\Omega}$

sans tenir compte de ce qui se passe dans d'autres macrobandes. S'il est clair que toutes les macrobandes sont couvertes par cette méthode, nous pouvons citer au moins deux sources d'incompatibilité qui sont introduites implicitement par cette méthode. Premièrement, de nouvelles lignes sont ajoutées pour couvrir les macrobandes de petites sections qui pourraient se glisser entre les lignes uniformément générées. Deuxièmement, quand une ligne est générée pour une macrobande, le centre d'un sens quelconque sera généralement privilégié pour sa position. Si plusieurs lignes sont désirables pour une macrobande, leur position est déterminée localement car une macrobande est considérée comme une géométrie complète et indépendante. Cette procédure consiste à la fois en un déplacement et une sélection des lignes. Dans tous les cas, les lignes utilisées se trouvent différentes de celles générées uniformément. Les résultats obtenus peuvent aussi être moins faciles à valider que ceux basés sur des lignes uniformément générées.

### 3.3.3 Avantages des macrobandes

La technique des macrobandes présente plusieurs avantages dont la possibilité de générer des lignes plus intelligemment, c'est son avantage majeur. Si la géométrie d'une macrobande est connue, des lignes peuvent être générées de façon économique et dynamique. Au fur et à mesure de l'avancement du calcul, des lignes pourront être ajoutées ou enlevées pour chaque macrobande individuellement afin d'obtenir la meilleure performance tout en gardant une précision locale élevée.

Un autre avantage concerne la discrétisation angulaire. Une région est dite **vue** par une autre région dans une direction donnée, s'il existe une ligne dans cette direction qui rencontre les deux régions. Nous remarquons que la visibilité de deux régions est mutuelle, c'est-à-dire, quand une région voit une autre région dans une direction, cette dernière voit la première nécessairement dans la même direction. Dans la figure 3.4, la région 1 voit la région 2 dans tout angle  $\hat{\Omega}$  entre  $\hat{\Omega}_1$  et  $\hat{\Omega}_2$ . Le fonctionnement de cette visibilité des régions peut être traduite en macrobandes. Deux régions qui se voient dans une direction  $\hat{\Omega}$  se trouvent nécessairement dans au moins une macrobande commune de la direction  $\hat{\Omega}$ . Nous pouvons envisager une procédure qui peut générer une quadrature angulaire dépendante de la géométrie. La quadrature angulaire générée peut assurer la visibilité mutuelle de certaines régions privilégiées. Ce faisant, il est possible d'atténuer l'effet de raie ("*ray effect*") causé par l'invisibilité de certaines régions dans les cas où le nombre de directions s'avère insuffisant à couvrir des interactions importantes.

Comme toutes les lignes d'intégration dans une macrobande rencontrent les mêmes régions dans le même ordre, le calcul se répète d'une ligne à une autre en changeant seulement la longueur des segments. Il est alors possible de tirer plus de performance sur des machines vectorielles. Nous n'avons pas pu tester cette possibilité parce que nous n'avions pas accès à des machines vectorielles.

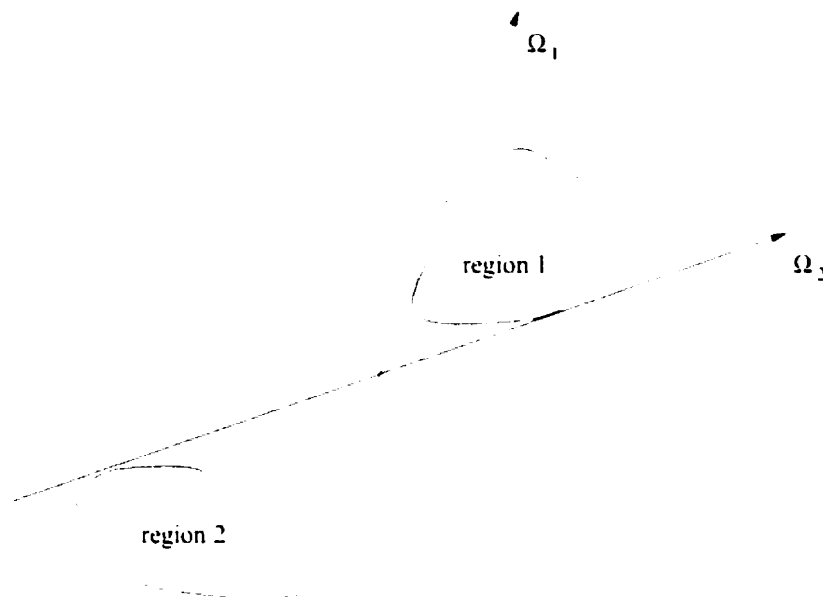


Figure 3.4 La visibilité des régions

Le dernier avantage est la réduction de la grandeur des fichiers des lignes. Comme les lignes sont groupées en macrobandes, le numéro de région d'un segment est stocké par macrobande au lieu de l'être par ligne d'intégration. Nous observons en moyenne une économie de 50% d'espace pour le fichier de lignes. Si la géométrie d'une macrobande est stockée, nous n'aurons peut-être plus besoin de stocker les lignes, puisqu'elles pourront être générées dynamiquement.

### 3.3.4 Temps de calcul et temps de communication

Le temps de calcul sur une macrobande est essentiellement la somme des temps de calcul sur chacune de ses lignes. Supposons que  $m$  est une macrobande avec  $N_m$  lignes de  $K_m$  segments, en utilisant la formule 3.7 de temps de calcul sur une ligne.

nous obtenons le temps de calcul sur la macrobande  $m$ :

$$t_m = N_m(2t_s + 2t_r) + N_m K_m(5t_s + 7t_r + t_p). \quad (3.12)$$

Le terme dominant dans l'équation ci-dessus est toujours le dernier. Le temps de communication n'est pas changé et est donné par l'équation 3.10, car c'est toujours le flux qui est communiqué entre les différents processeurs.

### 3.3.5 Répartition de la charge

En introduisant le concept de macrobande, nous ajoutons un degré de complexité de plus dans la répartition de la charge, car toutes les macrobandes n'ont pas le même nombre de lignes ni le même nombre de segments par ligne. Nous proposons alors de répartir la charge en nous basant sur le nombre de segments au lieu de nous baser sur le nombre de macrobandes, car c'est le nombre de segments qui domine le temps de calcul sur une macrobande.

Comme actuellement nous faisons un tri sur les lignes uniformément générées pour reconstruire les macrobandes, le nombre de segments est compté pour chaque macrobande. Les macrobandes sont ensuite réparties pour chaque processeur avec un nombre de segments balancé. En fait, la génération de lignes et le tri sont réalisés sur chaque processeur parallèlement et chaque processeur détermine quelles sont des macrobandes à garder selon son numéro d'identification dans le contexte DRAGON (voir la variable `me` dans la section 3.4).

Quant à l'approche analytique, comme nous ne disposons pas de lignes lors de la répartition du calcul, il faut trouver d'autres moyens pour évaluer la charge. En fait, il est facile de trouver quelles sont les régions rencontrées par une macrobande (voir section 3.3.1) et par conséquent le nombre de régions rencontrées. Si plusieurs

lignes peuvent être utilisées pour une macrobande, leur nombre total dépend en principe de la section de cette dernière. Mais si nous choisissons de varier le nombre de lignes au cours du calcul, nous ajoutons un facteur non déterministe sur le temps de calcul par macrobande et la stratégie de répartition devient alors plus sophistiquée.

### 3.4 Utilitaires parallèles dans la librairie GANLIB

La librairie GANLIB (ROY R. and HÉBERT A. and ROY R., 2000) dispose de trois modules utilitaires pour le calcul parallèle. Le module INITP sert à initialiser le calcul parallèle. Sa tâche principale est de trouver tous les processeurs disponibles dans la machine virtuelle et de faire exécuter des procédures enfants sur des processeurs. Dans la mesure du possible, le module INITP ne lance pas deux procédures sur la même machine. Les modules SENDP et RECVP travaillent ensemble. Ils permettent de communiquer entre les processus au moyen des objets. Nous allons maintenant donner un exemple d'utilisation de ces modules.

Nous montrons maintenant les démarches à faire pour démarrer deux processus dans l'environnement PVM. Nous supposons que le démon de PVM est déjà en fonction et que les stations sont aussi ajoutées dans la machine virtuelle. Dans la figure 3.5, nous déclarons d'abord trois objets de type `LINKED_LIST`: `P0`, `P1` et `PVM`. Pour chaque processus, le logiciel PVM attribue un numéro d'identification, `TID` (*Task ID*). Le `TID` est unique pour chaque processus sur la machine virtuelle. Le module `INITP` associe à chaque processus un numéro qui peut être utilisé dans le contexte de `CLÉ-2000` ou de `DRAGON`. L'objet `PVM` est donc utilisé pour enregistrer les `TIDs` et leur numéro associés des deux processus créés. Suite à la déclaration des modules utilisés, nous déclarons l'entier `me` qui prendra le numéro du processus courant. La chaîne de caractère `tache` dénote l'exécutable auquel va correspondre

```

LINKED_LIST PO P1 PVM ;
MODULE      INITP: SENDP: RECV: ;
INTEGER     me ;
STRING      tache := 'my_prgm' ;
PVM := INITP: <<tache>> :: NPROCS 2 >>me<< ;
...
IF me 0 = THEN
    PO := ... ;    ! un objet complet
    P1 := RECV: PVM :: FROM 1 ;
ELSE
    P1 := ... ;    ! un autre objet complet
    SENDP: P1 PVM :: TO 0 ;
ENDIF ;

```

Figure 3.5 Utilitaires parallèle dans DRAGON

le processus d'enfant. Le module `INITP` crée un processus d'enfant à partir du programme nommé par la variable `tache`. Il retourne le numéro d'identification de processus dans le contexte `DRAGON` dans la variable d'entier `me`.

Le problème à calculer est divisé en deux parties. Selon la valeur de `me`, chaque processus prend en charge la partie qui lui est attribuée et détermine aussi pour chacun un objet complet. Pour trouver la bonne réponse, les deux processus doivent communiquer au moins un des deux objets: `P0` ou `P1`. Dans la figure 3.5, c'est le processus 1 qui envoie son objet au processus 0. Une fois l'objet `P1` reçu, le processus 0 peut générer le résultat final.

En principe, rien ne nous empêche de générer les lignes d'intégration par un processeur maître et de transmettre à chaque processeur esclave la partie qui lui est distribuée en utilisant les modules `SENDP` et `RECEVP`. Mais dans la pratique, il y a deux raisons pour ne pas le faire. Premièrement, quand le processeur maître travaille pour générer les lignes d'intégration, les processeurs esclaves se trouvent tous dans un état d'attente. Deuxièmement, le fichier des lignes est souvent volumineux et le temps de communication de ce dernier est par conséquent non négligeable. Si

la procédure de génération des lignes se répète dans chaque processeur au lieu de laisser les processeurs en attente, nous pouvons économiser le temps de communication.

Évidemment, l'idéal consiste à paralléliser le module EXCELT. S'il est facile à réaliser pour les trois options de parallélisation par ligne, il est loin d'être évident pour la parallélisation par macrobandes pour des raisons discutées auparavant. Nous présenterons maintenant différents résultats numériques obtenus pour les développements séquentiels et parallèles effectués dans le cadre de cette thèse.



## CHAPITRE 4

### RÉSULTATS NUMÉRIQUES

#### 4.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons présenter trois tests pour valider le nouveau module du calcul de transport MCI, basé sur la méthode des caractéristiques, pour des géométries tridimensionnelles.

Le premier test consiste à calculer des incréments de sections efficaces des barres de compensation dans une supercellule d'un réacteur de type CANDU. Il est étudié en profondeur et en largeur pour illustrer toutes les options possibles du module MCI. Les résultats obtenus sont comparés à ceux obtenus par le module EXCELL qui est un module basé sur la méthode des probabilités de collision hautement optimisé. Les effets sur la précision et la performance des utilisations des techniques SCR et TMT aussi du calcul parallèle sont tous présentés ou illustrés.

Le deuxième test recourt au même type de calcul que le premier mais porte sur les barres liquides dans un réacteur CANDU. En plus de présenter les incréments des sections efficaces, nous l'utilisons pour comparer les mémoires physiques utilisées par les modules MCI et EXCELL.

Le troisième test est utilisé pour montrer la fonctionnalité du module MCI dans les calculs cellulaires des réacteurs PWR. Il consiste à calculer les valeurs de multiplicateur effectif et les résultats sont comparés à ceux du module EXCELL.

#### 4.1.1 Critères de validation

Pour les calculs des incréments, nous utilisons les valeurs des erreurs relatives pour valider une option ou une méthode contre une autre. L'erreur relative, par rapport à la référence  $\Delta\Sigma_{ref}$ , d'un incrément calculé,  $\Delta\Sigma_{cal}$ , par une méthode ou une option d'une méthode est définie comme suit:

$$\frac{\Delta\Sigma_{cal} - \Delta\Sigma_{ref}}{\Delta\Sigma_{ref}} \times 100. \quad (4.1)$$

De façon générale, les erreurs relatives inférieures à 0.1% sont considérées négligeables, par conséquent, les résultats correspondant sont considérés identiques. Par contre, quand la valeur de  $\Delta\Sigma$  est très faible, nous pouvons admettre une erreur relative légèrement plus élevée.

#### 4.2 Barres de compensation

Dans cette section, nous allons étudier des supercellules de barre de compensation. Après la description du problème dans la section 4.2.1, nous expliquons les options de calcul qui sont utilisées dans les calculs dans la section 4.2.2. Les notations resteront valides dans tout le chapitre des résultats. Nous décidons d'utiliser un seul tableau dans la section 4.2.3 pour valider l'approximation exponentielle, car l'approximation exponentielle est beaucoup utilisée dans le reste des calculs et les résultats obtenus sont tous pour sa validation. Les effets d'accélération de la technique SCR sont approuvés dans la section 4.2.4 et nous y voyons comment la combinaison des méthodes d'accélération SCR et d'un paramètre accélère davantage le calcul. La technique du fusionnement des lignes (TMT) est validée dans la section 4.2.5. Les résultats montrent que la qualité des lignes d'intégration est très importante si seulement un nombre modeste de lignes est utilisé. Dans la sec-

tion 4.2.8, nous montrons la variation du laplacien géométrique durant le séjour du combustible dans le coeur du réacteur. Finalement, dans la section 4.2.9, nous montrons les profits apportés par le calcul parallèle pour terminer l'analyse des barres de compensation.

#### 4.2.1 Description du problème

Il y a 21 barres de compensation dans un réacteur CANDU de 600 MWe comme celui de Gentilly-2. Elles sont normalement toutes insérées dans le coeur afin d'aplatir la forme du flux et de donner une marge de manoeuvre suffisante pour contrecarrer l'effet du xénon lors d'une baisse importante de puissance. Les barres de compensation sont des cylindres d'acier légèrement absorbants et sont disposées verticalement dans le coeur du réacteur CANDU.

Nous utilisons un modèle de supercellule composé de deux cellules de combustible, d'une cellule de barre de compensation et des régions de modérateur de l'eau lourde. Une cellule de combustible est une cellule cartésienne tri-dimensionnelle avec une région de combustible, une région de calandre et une région de modérateur. Les deux premières sont représentées par des cylindres concentriques et la dernière occupe le reste de la cellule. Les deux cellules de combustible sont placées dans la direction  $Z$ . De la même manière, une cellule de barre de compensation est aussi une cellule cartésienne mais composée d'une région cylindrique d'acier absorbant et d'une région de modérateur. La cellule de barre de compensation est placée dans la direction  $Y$ . Un huitième de la supercellule est illustré dans la figure 4.1. La condition de symétrie est appliquée aux surfaces en avant, en haut et à droite. La condition de réflexion isotrope est appliquée aux surfaces en arrière, en bas et à gauche. La condition de symétrie fusionne tout simplement les régions symétriques en une seule région. L'approximation du courant isotrope sur les surfaces externes

introduit des erreurs numériques. Ces erreurs peuvent être encore plus importantes quand les surfaces se trouvent dans les régions de combustible et du mécanisme de réactivité tel que la barre de compensation. Le modèle supercellule de deux grappes de combustible minimise le nombre de surfaces externes dans la région de la barre de compensation et offre par conséquent meilleure approximation par rapport au modèle d'une seule grappe de combustible (ROY R., 1994). Une maille élémentaire cartésienne peut être divisée davantage en spécifiant le nombre de sous-intervalles dans chaque direction. Comme illustré dans la figure 4.1, nous avons choisi une division uniforme dans laquelle le nombre de sous-intervalles  $N$  est identique dans les trois directions. Dans nos calculs, nous avons seulement considéré les deux cas suivants:  $N = 1$  et  $N = 2$ . Nous allons référer le premier cas par *maillage normal* et le deuxième cas par *maillage raffiné* puisque c'est le premier cas qui est utilisé habituellement dans le calcul des supercellules CANDU. Le maillage normal comprend 46 régions et 35 surfaces alors que le maillage raffiné comprend 308 régions et 127 surfaces.

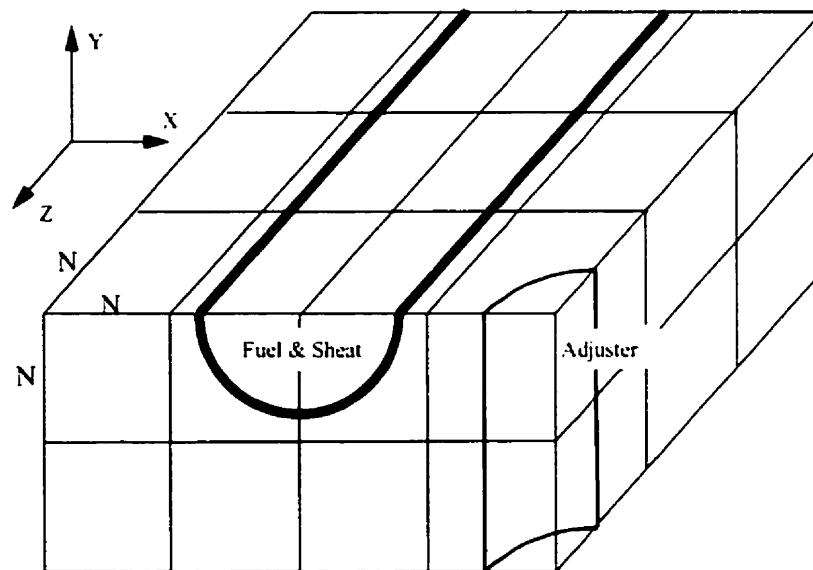


Figure 4.1 Supercellule d'une barre de compensation de Gentilly-2

Six types de barre de compensation sont considérés. Deux calculs sont nécessaires pour évaluer les incréments des sections efficaces pour une barre de compensation donnée. Dans le premier calcul, la région de la barre de compensation est remplie du modérateur d'eau lourde. Ce calcul sert à fournir la référence des paramètres de diffusion qui sont nécessaires pour calculer les incréments des sections efficaces. Le calcul de référence correspond au cas où la barre de compensation est complètement extraite du coeur. Dans le deuxième calcul, le cylindre de la barre de compensation est divisé en zones concentriques: la zone centrale contenant de l'eau lourde et la zone périphérique contenant de l'acier inoxydable. Ce deuxième calcul correspond à l'insertion complète de la barre dans le coeur du réacteur. Dans les deux cas, l'équation de transport est résolue par une recherche critique avec le modèle de fuite de premier ordre (TYPE B). Les procédés de condensation et d'homogénéisation sont alors faits avec les flux obtenus. Les propriétés sont condensées à deux groupes énergétiques tout en gardant le petit effet de *up-scattering* du groupe thermique au groupe rapide.

#### 4.2.2 Options de calcul

Pour le maillage normal, nous utilisons à tour de rôle les quadratures  $EQ_4$  et  $EQ_6$  associées aux densités 2.5 lignes/cm<sup>2</sup>, 4.0 lignes/cm<sup>2</sup> et 10.0 lignes/cm<sup>2</sup> respectivement. Le maillage raffiné nécessite une plus grande densité de lignes et nous utilisons la quadrature angulaire  $EQ_4$  associée à la densité de 40.0 lignes/cm<sup>2</sup> afin d'être certain que toutes les régions soient traversées au moins par une ligne dans chaque direction pour les six types de barre de compensation. Les résultats obtenus sont utilisés comme référence lors de la comparaison des méthodes et des différentes options.

Le module EXCELL, basé sur la méthode des probabilités de collision, est un

solveur de DRAGON hautement optimisé pour les problèmes du transport en trois dimensions. À titre de comparaison, chaque problème est calculé par le module EXCELL en utilisant exactement les mêmes options de calcul, en ce qui concerne la quadrature angulaire et la densité des lignes, que le solveur caractéristiques MCI. Sept options de calcul sont utilisées dans le solveur MCI pour chaque problème, un calcul pour chaque option. Les explications des options sont données ci-dessous:

MCI-a: les lignes d'intégration sont fusionnées au premier niveau et la fonction exponentielle est évaluée par l'approximation d'interpolation;

MCI-b: les lignes d'intégration sont fusionnées au premier niveau et la fonction exponentielle est calculée de façon exacte;

MCI-c: la fonction exponentielle est toujours évaluée par l'approximation d'interpolation. Les lignes fusionnées au premier niveau sont utilisées dans le premier calcul. Après que la convergence soit atteinte, le calcul est repris avec les lignes originales en utilisant toujours l'approximation d'interpolation pour évaluer la fonction exponentielle;

MCI-d: dans le premier calcul, les lignes fusionnées au premier niveau sont utilisées et la fonction exponentielle est évaluée par l'approximation d'interpolation. Quand la convergence est atteinte, le calcul est repris avec les lignes originales tout en calculant exactement la fonction exponentielle;

MCI-e: les lignes d'intégration originales sont utilisées et la fonction exponentielle est évaluée par l'approximation d'interpolation;

MCI-f: les lignes d'intégration originales sont utilisées et la fonction exponentielle est calculée exactement.

MCI-g: les lignes sont fusionnées au deuxième niveau et la fonction exponentielle est évaluée par l'approximation d'interpolation.

### 4.2.3 Validation de l'approximation exponentielle

Nous avons présenté comment utiliser des tables pour calculer la fonction exponentielle dans la section 2.7, nous montrons maintenant la précision de cette approximation.

Le tableau 4.1 nous montre les valeurs de  $\Delta\Sigma$  d'une barre de compensation de type BCAINT dans un coeur neuf. Nous avons utilisé la quadrature  $EQ_4$  et la densité de 4.0 lignes/cm<sup>2</sup> dans ce calcul. L'erreur relative pour la valeur d'incrément d'une section efficace est présentée dans la colonne de différence du tableau 4.1.

Nous remarquons que la différence entre l'utilisation d'une exponentielle exacte et l'utilisation de l'approximation par l'interpolation est négligeable dans ce calcul. Nous avons aussi comparé ces deux approches pour d'autres calculs de supercellule dans le cadre d'un réacteur CANDU, nous avons observé des résultats semblables. Dans le reste du chapitre, à moins que le contraire n'ait été clairement spécifié, les résultats sont obtenus en utilisant l'approximation par l'interpolation pour les calculs exponentiels.

### 4.2.4 Validation de la technique SCR

Dans les calculs présentés dans cette sections, nous utilisons 4.0 lignes/cm<sup>2</sup> avec la quadrature  $EQ_4$ . Les barres de compensation sont toutes à leur position nominale, c'est-à-dire complètement insérées dans le coeur. Pour chaque type de barre de compensation, nous avons effectué quatre fois le même calcul tout en modifiant les méthodes d'accélération utilisées. Dans la figure 4.2, nous avons tracé la précision de solution durant la procédure d'itération pour les six types de barre de compensation. La précision d'une itération est définie comme l'erreur relative du flux par rapport à la dernière itération interne. Nous constatons, dans les figures 4.2, des

Tableau 4.1 Valeurs de  $\Delta\Sigma$  d'une barre de compensation de type BCAINT pour valider l'approximation exponentielle par l'interpolation

Type de $\Delta\Sigma$	Exponentielle exacte	Exponentielle par interpolation	Différence (%)
$\Delta\Sigma^1$	7.1219E-4	7.1219E-4	0.00
$\Delta\Sigma_a^1$	1.3167E-5	1.3170E-5	0.02
$\Delta\Sigma_{s0}^{11}$	6.2830E-4	6.2830E-4	0.00
$\Delta\Sigma_{s0}^{12}$	1.5224E-7	1.5226E-7	0.01
$\Delta\Sigma^2$	3.3569E-4	3.3566E-4	-0.01
$\Delta\Sigma_a^2$	2.6218E-4	2.6216E-4	-0.01
$\Delta\Sigma_{s0}^{21}$	7.0704E-5	7.0723E-5	0.03
$\Delta\Sigma_{s0}^{22}$	7.3391E-5	7.3347E-5	-0.06

augmentations d'erreur occasionnellement. En fait, une augmentation d'erreur correspond généralement à la première itération interne à l'intérieur d'une itération externe. Comme la source de diffusion est mise à jour seulement au début d'une itération externe, le flux de la première itération interne voit une amélioration importante par rapport au flux obtenu dans la dernière itération interne où une source ancienne de diffusion est utilisée. Les augmentations des erreurs relatives s'avèrent donc de fausses représentations de la précision.

Sans être indiquée dans les figures, la méthode de balancement est utilisée dans tous les quatre cas, car il est important que la population des neutrons soit conservée dans le domaine entier. Ainsi, la procédure **Free** est la procédure de base qui applique seulement la méthode de balancement. La procédure **ACC** applique en plus la méthode d'accélération à un paramètre (voir Annexe I), la procédure **SCR** applique la méthode de *self-collision rebalancing* et la procédure **SCR+ACC** applique à la fois la méthode d'accélération à un paramètre et la méthode *self-collision rebalancing*. De la figure 4.2(a) à la figure 4.2(f), nous constatons que la technique

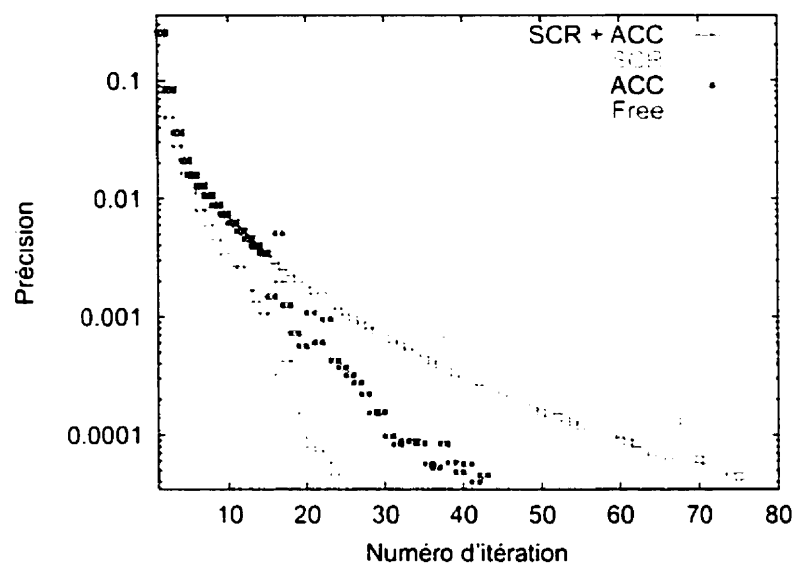


SCR donne une meilleur accélération par rapport à la méthode d'accélération à un paramètre dans le cadre du calcul de supercellule CANDU. Encore plus intéressant, nous constatons que la combinaison des deux méthodes conduit à une performance bien meilleure que n'importe laquelle des deux. Finalement, le nombre total d'itération est comparable à celui obtenu par le module EXCELL du code DRAGON.

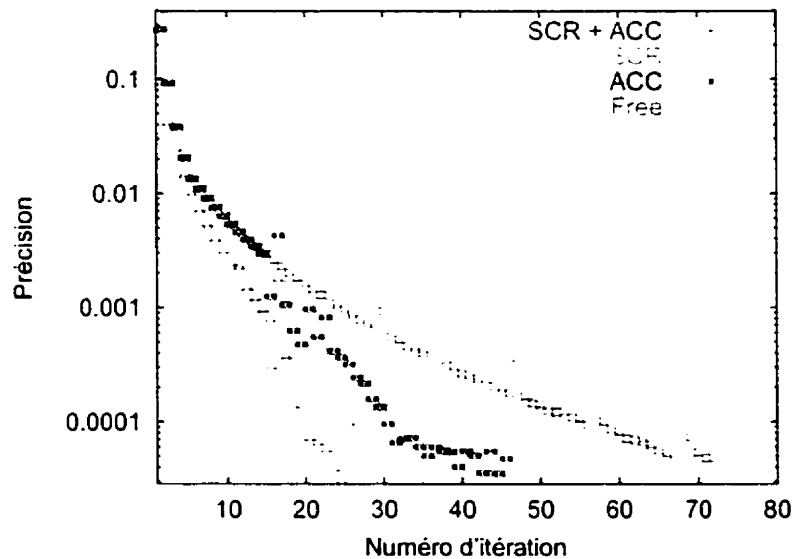
#### 4.2.5 Validation de la technique TMT

Pour comparer les différentes approches disponibles dans le solveur MCI, nous effectuons des calculs des incréments des sections efficaces pour les six types de barres de compensation. Les sept options, décrites dans la page 4.2.2, sont utilisées à tour de rôle. Par contre les résultats de toutes les options ne sont pas présentés afin d'alléger la redondance sur la présentation des résultats. À titre de comparaison, les mêmes calculs sont encore une fois effectués par le module EXCELL.

Sur le maillage normal de la supercellule, nous appliquons la quadrature  $EQ_4$  associée avec une densité 4.0 lignes/cm<sup>2</sup>. L'option MCI-f du module MCI, qui utilise des lignes d'intégration originales avec l'évaluation exacte des fonctions exponentielles, sert comme la référence. Les résultats du module EXCELL et ceux du module MCI utilisant différents niveaux de fusionnement de lignes avec l'approximation des fonctions exponentielles par interpolation (MCI-a, MCI-e et MCI-g) sont comparés à la référence. Les différences sont évaluées en utilisant l'équation 4.1. Du tableau 4.2 au tableau 4.7, nous constatons que les résultats de MCI-f, de MCI-a, de MCI-e et ceux du module EXCELL sont généralement hautement consistants. Occasionnellement, nous constatons une différence au dessus de 0.20% dans ces quatre colonnes des six tableaux. Par toutes ces cohérences des résultats, nous pouvons tirer les conclusions suivantes. Premièrement, la cohérence entre la colonne MCI-f

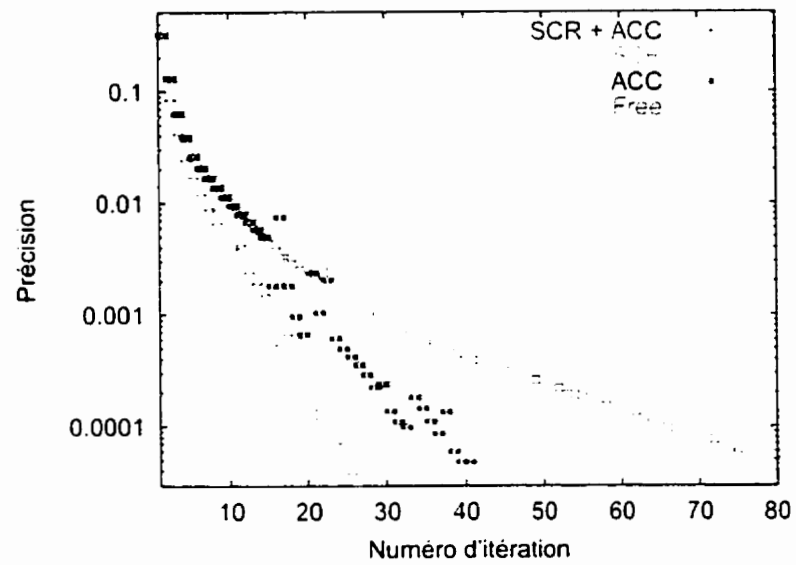


(a) BCAINT

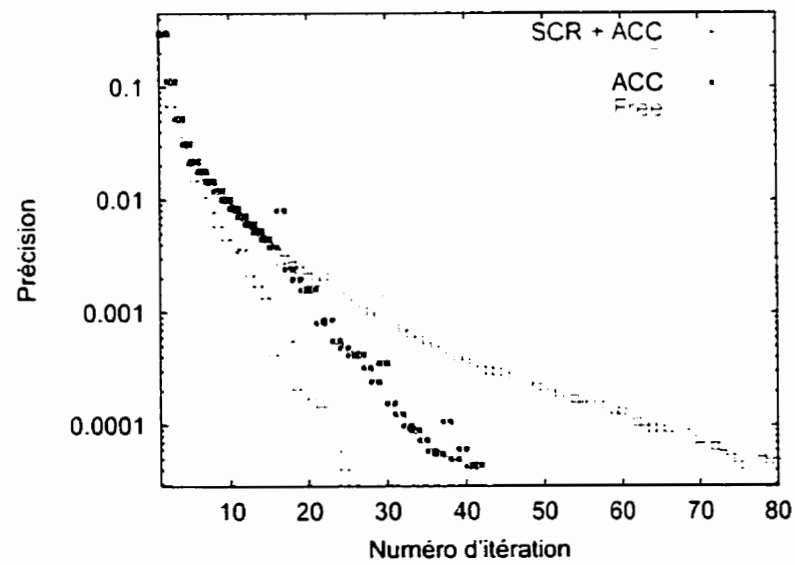


(b) BCAOUT

Figure 4.2 Précision contre itération pour les six types de barres de compensation

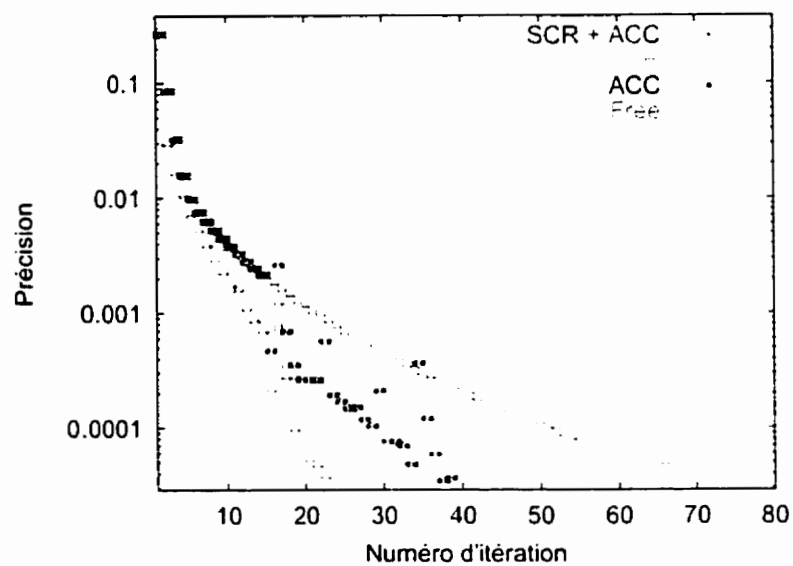


(c) BCBINT

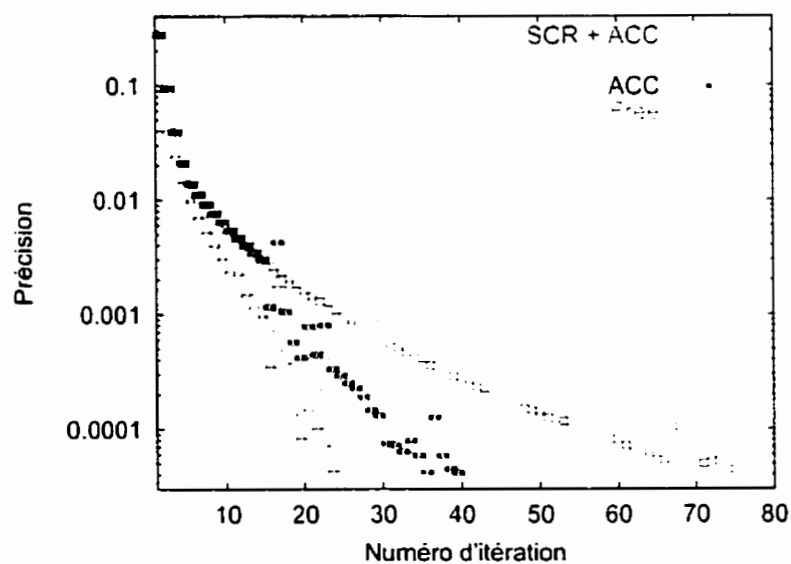


(d) BCCINT

Figure 4.2 Précision contre itération pour les six types de barres de compensation (suite)



(e) BCCOUT



(f) BCDINT

Figure 4.2 Précision contre itération pour les six types de barres de compensation (suite et fin)

et la colonne EXCELL confirme numériquement l'équivalence entre la méthode des caractéristiques et la méthode des probabilités de collision quand les mêmes lignes d'intégration sont utilisées. Même s'il a été possible d'en faire la démonstration mathématique (voir section 2.5), les opérations de réduction auraient pu amener des distorsions numériques: tel n'est pas le cas. Ensuite, la cohérence entre la colonne MCI-f et la colonne MCI-e affirme que l'application de l'approximation des fonctions exponentielles par interprétation est adéquate dans le calcul des supercellules du réacteur CANDU. Troisièmement, la cohérence entre la colonne MCI-f et la colonne MCI-a valide la technique de fusionnement des lignes au premier niveau. La différence entre MCI-g et MCI-f se trouve en général être la plus élevée dans les tableaux 4.2 à 4.7, mais la valeur est toujours inférieure à 1% sauf une fois. La seule fois où la différence relative dépasse 1% est celle de  $\Delta\Sigma_{00}^{22}$  pour la barre de compensation de type BCCOUT. Alors que le volume de la barre de compensation de type BCCOUT est le plus petit parmi tous les six types de barre de compensation étudiés. Cette augmentation sur la référence est probablement causée par le manque de lignes d'intégration et/ou par un mauvais positionnement des lignes dans la région de barre de compensation.

Regardons le tableau 4.8 où la valeur de  $\Delta\Sigma_{00}^{22}$  obtenue par différents calculs est comparée. Pour chaque type de calcul, MCI-f, MCI-g ou EXCELL, nous avons utilisé deux densités de lignes 4.0 lignes/cm<sup>2</sup> et 10.0 lignes/cm<sup>2</sup>. La variation de la valeur de  $\Delta\Sigma_{00}^{22}$  entre les deux densités pour le même calcul se trouve dans la dernière colonne du tableau. La valeur de  $\Delta\Sigma_{00}^{22}$  obtenue par MCI-f, qui est l'option la plus rigoureuse du module MCI, varie -1.37% de la densité 4.0 lignes/cm<sup>2</sup> à la densité 10.0 lignes/cm<sup>2</sup>, ceci éprouve une certaine faiblesse des lignes uniformément générées pour des petites régions. La variation est légèrement moins élevée pour la méthode des probabilités de collision actuellement utilisée dans le module EXCELL, ceci est probablement dû à la normalisation des matrices des probabilités (WU G.J.

Tableau 4.2 Valeurs de  $\Delta\Sigma$  pour une barre de compensation de type BCAINT (maillage normal)

Type de $\Delta\Sigma$	MCI-f (réf.)	MCI-a (%)	MCI-e (%)	MCI-g (%)	EXCELL (%)
$\Delta\Sigma^1$	7.1219E-4	0.04	0.00	0.11	-0.01
$\Delta\Sigma_a^1$	1.3167E-5	0.10	0.02	0.25	-0.03
$\Delta\Sigma_{s0}^{11}$	6.2830E-4	0.04	0.00	0.09	0.00
$\Delta\Sigma_{s0}^{12}$	1.5224E-7	0.15	0.01	0.35	-0.03
$\Delta\Sigma^2$	3.3569E-4	0.00	-0.01	0.13	-0.03
$\Delta\Sigma_a^2$	2.6218E-4	0.10	-0.01	0.30	-0.02
$\Delta\Sigma_{s0}^{21}$	7.0704E-5	0.08	0.03	0.29	-0.04
$\Delta\Sigma_{s0}^{22}$	7.3391E-5	-0.39	-0.06	0.57	-0.07

and ROY R., 1998).

La variation pour MCI-g, 0.01%, est la plus faible parmi les trois. Deux explications sont possibles. Dans la première explication, comme le nombre de lignes ne varie pas beaucoup pour MCI-g, de 6815 lignes à 7038 lignes, il est normal qu'une faible variation sur le nombre de lignes entraîne une faible variation sur les résultats obtenus. La deuxième explication consiste à dire que la technique de fusionnement au deuxième niveau, tout en réduisant grandement le nombre des lignes utilisées, compense la mauvaise qualité des lignes. Cette dernière semble plus juste car les deux résultats de MCI-g sont tous très proches de ceux de MCI-f utilisant la densité de 10.0 lignes/cm<sup>2</sup>. Nous allons voir ci-après que la qualité des lignes est plus importante que le nombre des lignes.

Nous avons vu que l'application de la technique de fusionnement des lignes donne d'excellents résultats pour un maillage normal dans le calcul de la supercellule de barre de compensation. nous montrons maintenant les résultats obtenus sur un maillage raffiné dans les tableaux 4.9 à 4.14. Comme l'utilisation de l'évaluation

Tableau 4.3 Valeurs de  $\Delta\Sigma$  pour une barre de compensation de type BCAOUT (maillage normal)

Type de $\Delta\Sigma$	MCI-f (réf.)	MCI-a (%)	MCI-e (%)	MCI-g (%)	EXCELL (%)
$\Delta\Sigma^1$	5.8004E-4	0.04	-0.01	0.12	-0.01
$\Delta\Sigma_a^1$	1.0757E-5	0.09	0.00	0.27	-0.04
$\Delta\Sigma_{s0}^{11}$	5.1101E-4	0.03	-0.01	0.09	-0.01
$\Delta\Sigma_{s0}^{12}$	1.2470E-7	0.15	0.01	0.36	-0.02
$\Delta\Sigma^2$	2.7287E-4	-0.03	-0.07	0.08	-0.05
$\Delta\Sigma_a^2$	2.1562E-4	0.11	0.00	0.30	-0.01
$\Delta\Sigma_{s0}^{21}$	5.8268E-5	0.09	-0.01	0.33	-0.03
$\Delta\Sigma_{s0}^{22}$	5.7114E-5	-0.54	-0.20	-0.73	-0.19

Tableau 4.4 Valeurs de  $\Delta\Sigma$  pour une barre de compensation de type BCBINT (maillage normal)

Type de $\Delta\Sigma$	MCI-f (réf.)	MCI-a (%)	MCI-e (%)	MCI-g (%)	EXCELL (%)
$\Delta\Sigma^1$	1.3154E-3	0.05	0.01	0.15	-0.01
$\Delta\Sigma_a^1$	2.3133E-5	0.10	0.00	0.32	-0.05
$\Delta\Sigma_{s0}^{11}$	1.1858E-3	0.04	0.01	0.12	-0.01
$\Delta\Sigma_{s0}^{12}$	2.5773E-7	0.16	0.00	0.46	0.04
$\Delta\Sigma^2$	5.6416E-4	0.04	-0.03	0.29	-0.06
$\Delta\Sigma_a^2$	4.1554E-4	0.13	0.00	0.46	-0.03
$\Delta\Sigma_{s0}^{21}$	1.0647E-4	0.12	0.00	0.51	-0.06
$\Delta\Sigma_{s0}^{22}$	1.4837E-4	-0.21	-0.10	-0.18	-0.13

Tableau 4.5 Valeurs de  $\Delta\Sigma$  pour une barre de compensation de type BCCINT (maillage normal)

Type de $\Delta\Sigma$	MCI-f (réf.)	MCI-a (%)	MCI-e (%)	MCI-g (%)	EXCELL (%)
$\Delta\Sigma^1$	1.0614E-3	0.04	0.00	0.12	-0.01
$\Delta\Sigma_a^1$	1.9112E-5	0.08	-0.01	0.26	-0.05
$\Delta\Sigma_{s0}^{11}$	9.4747E-4	0.03	0.00	0.09	-0.01
$\Delta\Sigma_{s0}^{12}$	2.1688E-7	0.13	0.00	0.38	-0.04
$\Delta\Sigma^2$	4.7770E-4	0.03	-0.01	0.11	-0.03
$\Delta\Sigma_a^2$	3.6078E-4	0.09	0.00	0.34	-0.03
$\Delta\Sigma_{s0}^{21}$	9.4869E-5	0.07	-0.02	0.35	-0.06
$\Delta\Sigma_{s0}^{22}$	1.1668E-4	-0.18	-0.03	-0.59	-0.01

Tableau 4.6 Valeurs de  $\Delta\Sigma$  pour une barre de compensation de type BCCOUT (maillage normal)

Type de $\Delta\Sigma$	MCI-f (réf.)	MCI-a (%)	MCI-e (%)	MCI-g (%)	EXCELL (%)
$\Delta\Sigma^1$	3.8549E-4	0.02	0.00	0.10	-0.02
$\Delta\Sigma_a^1$	7.2512E-6	0.08	-0.01	0.18	-0.03
$\Delta\Sigma_{s0}^{11}$	3.3738E-4	0.03	0.00	0.09	-0.01
$\Delta\Sigma_{s0}^{12}$	8.4790E-8	0.13	-0.01	0.34	-0.01
$\Delta\Sigma^2$	1.8576E-4	-0.08	0.05	-0.19	-0.08
$\Delta\Sigma_a^2$	1.4930E-4	0.08	0.00	0.23	0.00
$\Delta\Sigma_{s0}^{21}$	4.0841E-5	0.02	-0.01	0.22	-0.02
$\Delta\Sigma_{s0}^{22}$	3.6369E-5	-0.74	0.30	-1.92	-0.40



Tableau 4.7 Valeurs de  $\Delta\Sigma$  pour une barre de compensation de type BCDINT (maillage normal)

Type de $\Delta\Sigma$	MCI-f (réf.)	MCI-a (%)	MCI-e (%)	MCI-g (%)	EXCELL (%)
$\Delta\Sigma^1$	5.8866E-4	0.04	-0.01	0.13	-0.01
$\Delta\Sigma_a^1$	1.0904E-5	0.09	-0.01	0.24	-0.04
$\Delta\Sigma_{\substack{11 \\ \substack{0 \\ 0}}}$	5.1892E-4	0.03	-0.01	0.09	-0.01
$\Delta\Sigma_{\substack{12 \\ \substack{0 \\ 0}}}$	1.2630E-7	0.19	0.00	0.36	-0.02
$\Delta\Sigma^2$	2.7630E-4	-0.01	-0.05	0.07	-0.05
$\Delta\Sigma_a^2$	2.1807E-4	0.12	-0.01	0.31	-0.01
$\Delta\Sigma_{\substack{21 \\ \substack{0 \\ 0}}}$	5.8863E-5	0.11	0.00	0.30	-0.03
$\Delta\Sigma_{\substack{22 \\ \substack{0 \\ 0}}}$	5.8110E-5	-0.55	-0.18	-0.94	-0.20

Tableau 4.8 Valeur de  $\Delta\Sigma_{\substack{22 \\ \substack{0 \\ 0}}}$  pour une barre de compensation de type BCCOUT

Options	4.0 lignes/cm <sup>2</sup>	10.0 lignes/cm <sup>2</sup>	Variation
MCI-f	3.6369E-5	3.5869E-5	-1.37
MCI-g	3.5671E-5	3.5705E-5	0.01
EXCELL	3.6225E-5	3.5995E-5	-0.63

Tableau 4.9 Valeurs de  $\Delta\Sigma$  pour une barre de compensation de type BCAlNT (maillage raffiné)

Type de $\Delta\Sigma$	MCI-e (réf.)	MCI-a (%)	MCI-g (%)	EXCELL (%)
$\Delta\Sigma^1$	7.0336E-4	0.01	0.02	0.00
$\Delta\Sigma_a^1$	1.3193E-5	0.04	0.06	-0.05
$\Delta\Sigma_{30}^{11}$	6.1937E-4	0.01	0.01	0.01
$\Delta\Sigma_{30}^{12}$	1.4642E-7	0.05	-0.01	-0.10
$\Delta\Sigma^2$	3.2711E-4	-0.01	-0.04	0.07
$\Delta\Sigma_a^2$	2.5902E-4	0.04	0.10	-0.07
$\Delta\Sigma_{30}^{21}$	7.0795E-5	0.04	0.10	-0.09
$\Delta\Sigma_{30}^{22}$	6.7973E-5	-0.22	-0.61	0.56

des fonctions exponentielles a déjà conduit à d'excellents résultats auparavant. nous ne répétons pas le calcul du maillage raffiné avec l'évaluation exacte des fonctions exponentielles. Néanmoins, en comparant avec les résultats de la méthode classique de DRAGON, qui évalue de façon exacte des fonctions exponentielles, nous pouvons conclure que l'approximation par interpolation des fonctions exponentielles reste valide pour des maillages raffinés dans des calculs supercellules. Nous observons que les résultats de MCI-a et MCI-e sont toujours très proches et que les différences entre MCI-e et MCI-g sont généralement réduites par rapport à celles observées pour le maillage normal. La technique de fusionnement est par conséquent une excellente approche pour des calculs supercellules au niveau de précision. Nous allons voir plus loin que les avantages en performance sont encore plus convaincants.

#### 4.2.6 Maillage raffiné contre maillage normal

Nous avons vu que les différentes options de MCI restent consistantes autant pour le maillage normal que pour le maillage raffiné. Nous allons maintenant comparer les

Tableau 4.10 Valeurs de  $\Delta\Sigma$  pour une barre de compensation de type BCAINT (maillage raffiné)

Type de $\Delta\Sigma$	MCI-e (réf.)	MCI-a (%)	MCI-g (%)	EXCELL (%)
$\Delta\Sigma^1$	5.7349E-4	0.03	0.05	0.00
$\Delta\Sigma_a^1$	1.0797E-5	0.06	0.12	-0.03
$\Delta\Sigma_{,0}^{11}$	5.0403E-4	0.03	0.03	0.01
$\Delta\Sigma_{,0}^{12}$	1.2030E-7	0.08	0.22	-0.08
$\Delta\Sigma^2$	2.6664E-4	0.00	-0.07	0.05
$\Delta\Sigma_a^2$	2.1393E-4	0.07	0.21	-0.05
$\Delta\Sigma_{,0}^{21}$	5.8640E-5	0.08	0.23	-0.08
$\Delta\Sigma_{,0}^{22}$	5.2602E-5	-0.25	-1.19	0.44

Tableau 4.11 Valeurs de  $\Delta\Sigma$  pour une barre de compensation de type BCBINT

Type de $\Delta\Sigma$	MCI-e (réf.)	MCI-a (%)	MCI-g (%)	EXCELL (%)
$\Delta\Sigma^1$	1.2941E-3	0.02	0.02	-0.01
$\Delta\Sigma_a^1$	2.2970E-5	0.02	0.07	-0.07
$\Delta\Sigma_{,0}^{11}$	1.1664E-3	0.01	0.01	0.00
$\Delta\Sigma_{,0}^{12}$	2.4508E-7	0.06	0.16	-0.10
$\Delta\Sigma^2$	5.4452E-4	-0.02	-0.04	0.01
$\Delta\Sigma_a^2$	4.0430E-4	0.06	0.14	-0.08
$\Delta\Sigma_{,0}^{21}$	1.0474E-4	0.05	0.16	-0.11
$\Delta\Sigma_{,0}^{22}$	1.3997E-4	-0.26	-0.56	0.24

Tableau 4.12 Valeurs de  $\Delta\Sigma$  pour une barre de compensation de type BCCINT (maillage raffiné)

Type de $\Delta\Sigma$	MCI-f (réf.)	MCI-a (%)	MCI-g (%)	EXCELL (%)
$\Delta\Sigma^1$	1.0460E-3	-0.01	0.03	-0.01
$\Delta\Sigma_a^1$	1.9054E-5	0.02	0.06	-0.06
$\Delta\Sigma_{s0}^{11}$	9.3283E-4	-0.01	0.02	0.01
$\Delta\Sigma_{s0}^{12}$	2.0725E-7	0.06	0.15	-0.10
$\Delta\Sigma^2$	4.6322E-4	-0.05	-0.06	0.02
$\Delta\Sigma_a^2$	3.5344E-4	0.05	0.13	-0.07
$\Delta\Sigma_{s0}^{21}$	9.4088E-5	0.04	0.11	-0.11
$\Delta\Sigma_{s0}^{22}$	1.0958E-4	-0.36	-0.65	0.34

Tableau 4.13 Valeurs de  $\Delta\Sigma$  pour une barre de compensation de type BCCOUT (maillage raffiné)

Type de $\Delta\Sigma$	MCI-e (réf.)	MCI-a (%)	MCI-g (%)	EXCELL (%)
$\Delta\Sigma^1$	3.8278E-4	-0.01	0.02	-0.01
$\Delta\Sigma_a^1$	7.3435E-6	0.02	0.10	-0.02
$\Delta\Sigma_{s0}^{11}$	3.3354E-4	0.01	0.01	0.01
$\Delta\Sigma_{s0}^{12}$	8.2832E-8	0.01	0.12	-0.10
$\Delta\Sigma^2$	1.8317E-4	0.08	0.03	0.11
$\Delta\Sigma_a^2$	1.5055E-4	0.06	0.13	-0.05
$\Delta\Sigma_{s0}^{21}$	4.1894E-5	-0.06	0.04	-0.12
$\Delta\Sigma_{s0}^{22}$	3.2546E-5	0.10	-0.53	0.75

Tableau 4.14 Valeurs de  $\Delta\Sigma$  pour une barre de compensation de type BCDINT (maillage raffiné)

Type de $\Delta\Sigma$	MCI-e (réf.)	MCI-a (%)	MCI-g (%)	EXCELL (%)
$\Delta\Sigma^1$	5.8198E-4	-0.01	0.05	0.01
$\Delta\Sigma_a^1$	1.0947E-5	0.04	0.07	-0.05
$\Delta\Sigma_{s0}^{11}$	5.1178E-4	0.00	0.03	0.02
$\Delta\Sigma_{s0}^{12}$	1.2186E-7	0.03	0.18	-0.08
$\Delta\Sigma^2$	2.6998E-4	0.04	0.03	0.06
$\Delta\Sigma_a^2$	2.1641E-4	0.05	0.18	-0.06
$\Delta\Sigma_{s0}^{21}$	5.9262E-5	-0.03	0.15	-0.10
$\Delta\Sigma_{s0}^{22}$	5.3422E-5	0.05	-0.51	0.54

résultats du maillage normal contre les résultats du maillage raffiné. Nous utilisons toujours la quadrature  $EQ_1$ , mais une densité de 40.0 lignes/cm<sup>2</sup> est nécessaire afin d'assurer que toutes les régions du maillage raffiné soient couvertes pour chaque direction dans la quadrature angulaire et ce pour chaque type de barre de compensation. Les résultats de MCI-e sur le maillage raffiné servent comme références. À titre de comparaison, les résultats de MCI-g sont aussi montrés.

Du tableau 4.15 au tableau 4.20, nous constatons que les résultats sont très proches entre la densité de 4.0 lignes/cm<sup>2</sup> et celle de 10.0 lignes/cm<sup>2</sup> autant pour la méthode des caractéristiques (module MCI) que pour la méthode des probabilités de collision (module EXCELL). Par conséquent, pour un maillage donné, il existe une densité optimale de lignes, telle que, au-dessus de laquelle, plus de lignes ne donnent pas nécessairement plus de précision. Par contre, les écarts entre les résultats du maillage normal et les résultats du maillage raffiné sont plus élevés. Il est donc nécessaire de raffiner le maillage pour obtenir plus de précision au lieu d'augmenter tout simplement le nombre de lignes. Un maillage raffiné signifie plus de régions

Tableau 4.15 Valeurs de  $\Delta\Sigma$  pour la barre de compensation de type BCAINT

$\Delta\Sigma$	Maillage raffiné		Maillage normal			
	MCI-e	MCI-g	MCI-a		EXCELL	
	40.0	40.0	4.0	10.0	4.0	10.0
$\Delta\Sigma^1$	7.0336E-4 (ref.)	7.0348E-4 0.02	7.1248E-4 1.30	7.1210E-4 1.24	7.1204E-4 1.23	7.1168E-4 1.18
$\Delta\Sigma_a^1$	1.3193E-5	1.3201E-5 0.06	1.3180E-5 -0.10	1.3163E-5 -0.23	1.3165E-5 -0.21	1.3146E-5 -0.36
$\Delta\Sigma_{,0}^{11}$	6.1937E-4	6.1941E-4 0.01	6.2855E-4 1.48	6.2827E-4 1.44	6.2848E-4 1.47	6.2821E-4 1.43
$\Delta\Sigma_{,0}^{12}$	1.4642E-7	1.4660E-7 0.12	1.5247E-7 4.13	1.5220E-7 3.95	1.5224E-7 3.97	1.5195E-7 3.78
$\Delta\Sigma^2$	3.2711E-4	3.2699E-4 -0.04	3.3569E-4 2.62	3.3560E-4 2.60	3.3510E-4 2.44	3.3495E-4 2.40
$\Delta\Sigma_a^2$	2.5902E-4	2.5927E-4 0.10	2.6244E-4 1.32	2.6212E-4 1.20	2.6152E-4 0.97	2.6114E-4 0.82
$\Delta\Sigma_{,0}^{21}$	7.0795E-5	7.0863E-5 0.10	7.0762E-5 -0.05	7.0676E-5 -0.17	7.0407E-5 -0.55	7.0309E-5 -0.69
$\Delta\Sigma_{,0}^{22}$	6.7973E-5	6.7557E-5 -0.61	7.3108E-5 7.55	7.3340E-5 7.90	7.0407E-5 3.58	7.3667E-5 8.38

et nécessite plus de lignes d'intégration pour toutes les couvrir. Le nombre moyen des segments par ligne est aussi plus élevé que celui du maillage normal. Nous rappelons que l'effort de calcul, par rapport au nombre de régions, augmente de façon quadratique pour la méthode des probabilités de collision alors qu'il est linéaire pour la méthode de caractéristiques.

#### 4.2.7 Performance séquentielle de MCI

Dans les sections précédentes, nous avons vu que le solveur caractéristique MCI offre des résultats aussi précis (en mode séquentiel) que le solveur classique EXCELL du

Tableau 4.16 Valeurs de  $\Delta\Sigma$  pour la barre de compensation de type BCAOUT

$\Delta\Sigma$	Maillage raffiné		Maillage normal			
	MCI-e	MCI-g	MCI-a		EXCELL	
	40.0	40.0	4.0	10.0	4.0	10.0
$\Delta\Sigma^1$	5.7349E-4 (ref.)	5.7375E-4 0.05	5.8025E-4 1.18	5.7998E-4 1.13	5.8016E-4 1.16	5.7983E-4 1.11
$\Delta\Sigma_a^1$	1.0797E-5	1.0811E-5 0.13	1.0767E-5 -0.28	1.0753E-5 -0.41	1.0762E-5 -0.32	1.0747E-5 -0.46
$\Delta\Sigma_{,0}^{11}$	5.0403E-4	5.0417E-4 0.03	5.1119E-4 1.42	5.1096E-4 1.37	5.1128E-4 1.44	5.1102E-4 1.39
$\Delta\Sigma_{,0}^{12}$	1.2030E-7	1.2056E-7 0.22	1.2489E-7 3.82	1.2468E-7 3.64	1.2484E-7 3.77	1.2461E-7 3.58
$\Delta\Sigma^2$	2.6664E-4	2.6646E-4 -0.07	2.7278E-4 2.30	2.7272E-4 2.28	2.7254E-4 2.21	2.7236E-4 2.15
$\Delta\Sigma_a^2$	2.1393E-4	2.1437E-4 0.21	2.1586E-4 0.90	2.1560E-4 0.78	2.1540E-4 0.69	2.1511E-4 0.55
$\Delta\Sigma_{,0}^{21}$	5.8640E-5	5.8773E-5 0.23	5.8318E-5 -0.55	5.8250E-5 -0.67	5.8126E-5 -0.88	5.8048E-5 -1.01
$\Delta\Sigma_{,0}^{22}$	5.2602E-5	5.1977E-5 -1.19	5.6804E-5 7.99	5.7003E-5 8.37	5.7010E-5 8.38	5.7121E-5 8.59

Tableau 4.17 Valeurs de  $\Delta\Sigma$  pour la barre de compensation de type BCBINT

$\Delta\Sigma$	Maillage raffiné		Maillage normal			
	MCI-e	MCI-g	MCI-a		EXCELL	
	40.0	40.0	4.0	10.0	4.0	10.0
$\Delta\Sigma^1$	1.2941E-3 (ref.)	1.2944E-3 0.02	1.3161E-3 1.70	1.3153E-3 1.64	1.3161E-3 1.70	1.3151E-3 1.62
$\Delta\Sigma_a^1$	2.2970E-5	2.2985E-5 0.07	2.3156E-5 0.81	2.3121E-5 0.66	2.3157E-5 0.81	2.3116E-5 0.64
$\Delta\Sigma_{40}^{11}$	1.1664E-3	1.1665E-3 0.01	1.1863E-3 1.71	1.1857E-3 1.65	1.1865E-3 1.72	1.1858E-3 1.66
$\Delta\Sigma_{40}^{12}$	2.4508E-7	2.4547E-7 0.16	2.5815E-7 5.33	2.5764E-7 5.12	2.5833E-7 5.41	2.5769E-7 5.15
$\Delta\Sigma^2$	5.4452E-4	5.4428E-4 -0.04	5.6437E-4 3.65	5.6383E-4 3.55	5.6371E-4 3.52	5.6303E-4 3.40
$\Delta\Sigma_a^2$	4.0430E-4	4.0487E-4 0.14	4.1607E-4 2.91	4.1540E-4 2.75	4.1568E-4 2.81	4.1482E-4 2.60
$\Delta\Sigma_{40}^{21}$	1.0474E-4	1.0491E-4 0.16	1.0660E-4 1.78	1.0641E-4 1.59	1.0639E-4 1.58	1.0614E-4 1.34
$\Delta\Sigma_{40}^{22}$	1.3997E-4	1.3917E-4 -0.57	1.4806E-4 5.78	1.4818E-4 5.87	1.4777E-4 5.57	1.4794E-4 5.69



Tableau 4.18 Valeurs de  $\Delta\Sigma$  pour la barre de compensation de type BCCINT

$\Delta\Sigma$	Maillage raffiné		Maillage normal			
	MCI-e	MCI-g	MCI-a		EXCELL	
	40.0	40.0	4.0	10.0	4.0	10.0
$\Delta\Sigma^1$	1.0460E-3 (ref.)	1.0463E-3 0.03	1.0618E-3 1.51	1.0613E-3 1.46	1.0624E-3 1.57	1.0616E-3 1.49
$\Delta\Sigma_a^1$	1.9054E-5	1.9065E-5 0.06	1.9127E-5 0.38	1.9102E-5 0.25	1.9150E-5 0.50	1.9119E-5 0.34
$\Delta\Sigma_{40}^{11}$	9.3283E-4	9.3306E-4 0.02	9.4773E-4 1.60	9.4737E-4 1.56	9.4816E-4 1.64	9.4767E-4 1.59
$\Delta\Sigma_{40}^{12}$	2.0725E-7	2.0756E-7 0.15	2.1716E-7 4.78	2.1679E-7 4.60	2.1769E-7 5.04	2.1720E-7 4.80
$\Delta\Sigma^2$	4.6322E-4	4.6295E-4 -0.06	4.7782E-4 3.15	4.7758E-4 3.10	4.7791E-4 3.17	4.7755E-4 3.09
$\Delta\Sigma_a^2$	3.5344E-4	3.5389E-4 0.13	3.6112E-4 2.17	3.6068E-4 2.05	3.6165E-4 2.32	3.6100E-4 2.14
$\Delta\Sigma_{40}^{21}$	9.4088E-5	9.4190E-5 0.11	9.4936E-5 0.90	9.4814E-5 0.77	9.5022E-5 0.99	9.4846E-5 0.81
$\Delta\Sigma_{40}^{22}$	1.0958E-4	1.0887E-4 -0.65	1.1647E-4 6.29	1.1667E-4 6.47	1.1603E-4 5.89	1.1632E-4 6.15

Tableau 4.19 Valeurs de  $\Delta\Sigma$  pour la barre de compensation de type BCCOUT

$\Delta\Sigma$	Maillage raffiné		Maillage normal			
	MCI-e	MCI-g	MCI-a		EXCELL	
	40.0	10.0	4.0	10.0	4.0	10.0
$\Delta\Sigma^1$	3.8278E-4 (ref.)	3.8284E-4 0.02	3.8558E-4 0.73	3.8543E-4 0.69	3.8642E-4 0.95	3.8621E-4 0.90
$\Delta\Sigma_a^1$	7.3435E-6	7.3505E-6 0.10	7.2567E-6 -1.18	7.2487E-6 -1.29	7.2866E-6 -0.77	7.2776E-6 -0.90
$\Delta\Sigma_{40}^{11}$	3.3354E-4	3.3356E-4 0.01	3.3749E-4 1.18	3.3735E-4 1.14	3.3793E-4 1.32	3.3778E-4 1.27
$\Delta\Sigma_{40}^{12}$	8.2832E-8	8.2928E-8 0.12	8.4901E-8 2.50	8.4785E-8 2.36	8.5477E-8 3.19	8.5318E-8 3.00
$\Delta\Sigma^2$	1.8317E-4	1.8322E-4 0.03	1.8561E-4 1.33	1.8561E-4 1.33	1.8647E-4 1.80	1.8638E-4 1.75
$\Delta\Sigma_a^2$	1.5055E-4	1.5075E-4 0.13	1.4942E-4 -0.75	1.4930E-4 -0.83	1.5054E-4 -0.01	1.5032E-4 -0.15
$\Delta\Sigma_{40}^{21}$	4.1894E-5	4.1911E-5 0.04	4.0849E-5 -2.49	4.0831E-5 -2.54	4.1181E-5 -1.70	4.1138E-5 -1.80
$\Delta\Sigma_{40}^{22}$	3.2546E-5	3.2373E-5 -0.53	3.6100E-5 10.92	3.6225E-5 11.30	3.5860E-5 10.18	3.5995E-5 10.60

Tableau 4.20 Valeurs de  $\Delta\Sigma$  pour la barre de compensation de type BCDINT

$\Delta\Sigma$	Maillage raffiné		Maillage normal			
	MCI-e	MCI-g	MCI-a		EXCELL	
	10.0	10.0	1.0	10.0	1.0	10.0
$\Delta\Sigma^1$	5.8198E-4 (ref.)	5.8225E-4 0.05	5.8892E-4 1.19	5.8860E-04 1.14	5.8889E-4 1.19	5.8857E-4 1.13
$\Delta\Sigma_a^1$	1.0947E-5	1.0955E-5 0.07	1.0914E-5 -0.30	1.0900E-05 -0.43	1.0914E-5 -0.30	1.0898E-5 -0.45
$\Delta\Sigma_{10}^{11}$	5.1178E-4	5.1194E-4 0.03	5.1907E-4 1.42	5.1885E-04 1.38	5.1921E-4 1.45	5.1896E-4 1.40
$\Delta\Sigma_{10}^{12}$	1.2186E-7	1.2208E-7 0.18	1.2650E-7 3.81	1.2628E-07 3.63	1.2651E-7 3.82	1.2628E-7 3.63
$\Delta\Sigma^2$	2.6998E-4	2.7007E-4 0.03	2.7627E-4 2.33	2.7615E-04 2.29	2.7615E-4 2.29	2.7591E-4 2.20
$\Delta\Sigma_a^2$	2.1641E-4	2.1679E-4 0.18	2.1834E-4 0.89	2.1804E-04 0.75	2.1802E-4 0.74	2.1773E-4 0.61
$\Delta\Sigma_{10}^{21}$	5.9262E-5	5.9353E-5 0.15	5.8925E-5 -0.57	5.8847E-05 -0.70	5.8777E-5 -0.82	5.8701E-5 -0.95
$\Delta\Sigma_{10}^{22}$	5.3422E-5	5.3150E-5 -0.51	5.7788E-5 8.17	5.7996E-05 8.56	5.7990E-5 8.55	5.8053E-5 8.67

Tableau 4.21 Nombre total d'itérations interne pour les calculs de  $\Delta\Sigma$  des six types de barre de compensation

Quadrature Angulaire	Densité (lignes/cm <sup>2</sup> )	Nombre d'itérations	
		EXCELL	MCI-a
EQ <sub>1</sub>	2.5	265	289
	4.0	265	289
	10.0	265	291
	40.0	300	432
EQ <sub>6</sub>	2.5	267	291
	4.0	267	290
	10.0	267	289

code DRAGON, qui utilise la méthode des probabilités de collision. Maintenant, nous allons montrer quelques aspects concernant la performance du module MCI.

Dans le tableau 4.21, nous montrons le nombre d'itérations nécessaire pour le module EXCELL et pour le module MCI. Comme le nombre d'itérations est stable pour les sept options de MCI, nous avons utilisé une des sept options, l'option MCI-a, dans le tableau 4.21. Nous remarquons que, grâce à la technique SCR, le nombre d'itérations du module MCI est compétitif à celui du module EXCELL pour le maillage normal. Quand le maillage raffiné est utilisé, le module MCI utilise presque 50% de plus d'itérations alors que le module EXCELL n'utilise que 15% de plus d'itérations. Le module EXCELL se montre donc plus stable au raffinement du maillage. Cette meilleure stabilité provient probablement de la normalisation des probabilités de collision qui renforce les lois de conservation des neutrons. Bien que la population des neutrons soit théoriquement conservée pour la méthode des caractéristiques, les erreurs de troncature peuvent s'accumuler d'une itération à l'autre.

Dans le tableau 4.22, le temps de calcul utilisé par différentes options du solveur MCI est comparé à celui du solveur EXCELL pour le maillage normal. Le temps

de calcul est évalué sur une machine de type Pentium-II cadencé à 333 Mhz. Cette dernière dispose de 96 Mo de mémoire physique et de 128 Mo de mémoire virtuelle. La machine est peu chargée durant tout le calcul, ainsi le temps de calcul reflète relativement bien le temps de CPU. Nous voyons clairement le bénéfice en performance que chaque option du module MCI apporte à l'option originale qui correspond à l'option MCI-f. Nous remarquons que la performance de MCI-g est comparable au module EXCELL.

Afin de mieux évaluer l'avantage de la technique de fusionnement des lignes, le temps de fusionnement au premier niveau (TMT-1) dans les calculs MCI-a et le temps de fusionnement au deuxième niveau (TMT-2) dans les calculs MCI-g sont aussi montrés dans le tableau 4.22. À première vue, il nous semble que, malgré toutes les techniques utilisées pour augmenter la performance de la méthode des caractéristiques, le module MCI reste un peu moins rapide que le module EXCELL. Ceci est dû à la façon dont la technique de fusionnement est implantée. Actuellement, c'est le module EXCELT qui génère toutes les lignes d'intégration et le module MCI s'occupe de les fusionner avant de procéder au calcul sur des lignes. Dans le tableau 4.22, nous remarquons que le temps de fusionnement au premier niveau (TMT-1) est relativement faible et stable par rapport au temps de calcul et que le rapport varie de 4.21% à 4.72%. Parce que le fusionnement au premier niveau fusionne seulement les lignes voisines, il n'y a pas de tri à faire sur les lignes originales. Par contre, le temps de fusionnement au deuxième niveau est plus élevé et varie beaucoup par rapport au temps de calcul. Le rapport varie de 33.65% à 68.11% d'un calcul de  $EQ_4$  et de 2.5 lignes/cm<sup>2</sup> à un calcul de  $EQ_6$  et de 10.0 lignes/cm<sup>2</sup>.

Le temps de calcul est directement relié au nombre de lignes utilisés pour la méthode des caractéristiques. Le nombre de lignes est grandement réduit par la technique de fusionnement. Le tableau 4.23 nous montre que le fusionnement au premier

Tableau 4.22 Temps de calcul (secondes) des barres de compensation sur le maillage normal

Quadrature Angulaire	Méthode	Densité (lignes/cm <sup>2</sup> )		
		2.5	4.0	10.0
EQ <sub>4</sub>	EXCELL	897.0	1353.0	3202.0
	MCI-a	2908.0	4054.0	7559.0
	(TMT-1)	127.0	174.0	318.0
	MCI-b	5690.0	7931.0	14487.0
	MCI-c	3654.0	5811.0	20834.0
	MCI-d	5762.0	9991.0	20806.0
	MCI-e	4942.0	7952.0	19830.0
	MCI-f	9939.0	16070.0	40282.0
	MCI-g	1376.0	1925.0	4042.0
	(TMT-2)	463.0	789.0	2212.0
EQ <sub>6</sub>	EXCELL	1628.0	2593.0	6253.0
	MCI-a	5598.0	7763.0	14662.0
	(TMT-1)	239.0	327.0	692.0
	MCI-b	11007.0	15161.0	28324.0
	MCI-c	7388.0	11073.0	24844.0
	MCI-d	11460.0	17326.0	41764.0
	MCI-e	9759.0	15603.0	39177.0
	MCI-f	19555.0	31333.0	79066.0
	MCI-g	3270.0	4814.0	11620.0
	(TMT-2)	1577.0	2727.0	7914.0

Tableau 4.23 Nombre de lignes d'intégration avant et après le fusionnement

Quadrature Angulaire	Densité (lignes/cm <sup>2</sup> )	Nombre de lignes		
		Originales	TMT-1	TMT-2
EQ <sub>4</sub>	2.5	68391	29447 (2.32)	5703 (11.99)
	1.0	109751	39980 (2.75)	6288 (17.45)
	10.0	275262	69804 (3.94)	7092 (38.81)
	40.0	1105740	422211 (2.62)	78239 (14.13)
EQ <sub>6</sub>	2.5	133808	56821 (2.35)	10345 (12.93)
	1.0	215060	76745 (2.80)	11295 (19.04)
	10.0	539660	134490 (4.01)	13074 (41.28)

niveau réduit le nombre de lignes d'un facteur entre 2 et 4, tandis que le fusionnement au deuxième niveau le réduit avec un facteur entre 12 et 40. L'avantage du fusionnement au deuxième niveau est évident, par contre, le temps nécessaire pour fusionner des lignes au deuxième niveau n'est pas négligeable. Nous avons parlé du goulot d'étranglement dans la section 2.4, et nous l'avons observé dans notre calcul à maillage raffiné.

Comme il nous est difficile de faire une série de calculs sur une machine dédiée pendant plusieurs jours, nous avons pu le faire pour une courte période pendant la nuit, par exemple, pour certains de nos calculs. Nous allons montrer seulement le temps de calcul pour la barre de compensation BCAINT. Les temps montrés dans le tableau 4.24 correspondent aux calculs sur un maillage raffiné en utilisant 40.0 lignes/cm<sup>2</sup> à EQ<sub>4</sub>. Nous avons séparé le temps pour fusionnement (TMT) du temps de calcul itératif dans le module MCI afin de mettre en évidence l'effet

Tableau 4.24 Analyse du temps de calcul sur un maillage raffiné

Option	Calcul itératif	TMT	EXCELT	Total
MCI-a	16507.0	551.0	2328.0	19196.0
MCI-g	3820.0	22117.0	2337.0	28324.0

du goulot d'étranglement introduit par le fusionnement des lignes au deuxième niveau. À titre de comparaison, nous montrons aussi le temps pour générer les lignes originales dans le module EXCELT dans le tableau 4.24. La dernière colonne indique le temps réel utilisé pour terminer le calcul en question. Le temps de calcul de MCI-g est à peu près cinq fois plus petit par rapport à celui de MCI-a, ce qui est cohérent avec leur nombre de lignes d'intégration. Par contre, comme le fichier des lignes est de 144 Mo, le temps pour le fusionnement au deuxième niveau devient 40 fois plus grand que celui au premier niveau. C'est donc un véritable goulot d'étranglement.

#### 4.2.8 Calcul de *burnup*

Les résultats présentés auparavant sont tous basés sur du combustible neuf ("*fresh fuel*") sans exception, nous allons maintenant faire un calcul de burnup en suivant l'évolution du combustible dans le cœur pour tous les six types de barre de compensation.

Les propriétés neutroniques sont générées par le code DRAGON pour une période de 600 jours. La puissance d'une grappe est supposée être à 615 kW alors que la puissance spécifique est de 31.9713 kW/kg. Après le calcul pour le combustible neuf, nous faisons dix calculs à l'intervalle de 5 jours. Ensuite, nous calculons à chaque 10 jours pour cinq fois suivi par dix calculs à 50 jours. Il y a donc 26 calculs pour chaque type de barre de compensation.

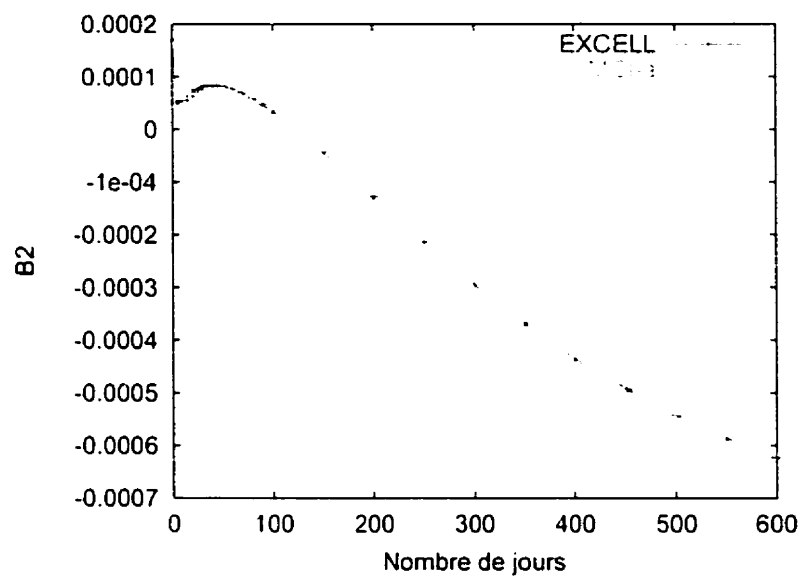


Nous avons choisi d'utiliser la quadrature  $EQ_4$  accompagné par une densité de lignes de 4.0 lignes/cm<sup>2</sup>. Nous avons comparé l'option MCI-a contre le module EXCELL du code DRAGON. Les calculs sont tous effectués sur une machine de type Pentium-II cadencé à 350 Mhz, disposant de 64 Mo de mémoire vive et de 40 Mo de mémoire virtuelle. L'évolution des valeurs du laplacien géométrique est illustrée pour chaque type de compensation dans la figure 4.3. Nous constatons que les deux modules (deux méthodes) donnent des résultats presque identiques tout au long de l'évolution du combustible.

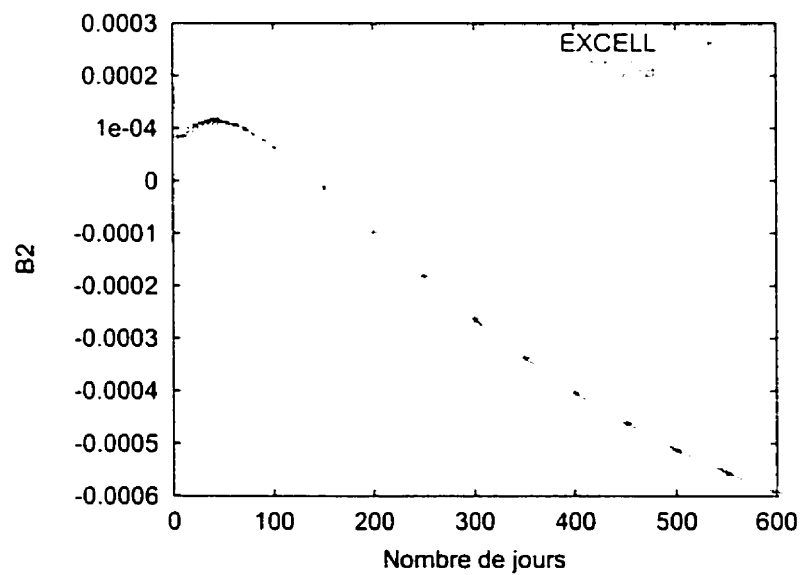
Le temps de calcul pour chaque étape est montré dans la figure 4.4, nous remarquons que le temps de calcul pour MCI-a varie selon la longueur d'intervalle d'une étape à l'autre, alors que celui pour EXCELL reste toujours le même pour le calcul de chaque étape. L'explication de ce phénomène est donnée ci-dessous. Le module MCI utilise la méthode des caractéristiques tandis que le module EXCELL est basé sur la méthode des probabilités de collision. Le temps de calcul pour la méthode des caractéristiques est proportionnel au nombre total d'itérations utilisées dans chaque calcul. Quand l'intervalle de temps rapetisse, le nombre total d'itérations pour le calcul à l'étape suivante est réduit. Par contre, pour la méthode des probabilités de collision, le temps de calcul est dominé par la construction des matrices de probabilités qui ne varie pas d'une étape à l'autre. Le gain de la réduction de nombre total d'itérations est par conséquent négligeable pour le module EXCELL.

#### **4.2.9 Performance parallèle de MCI**

Pour un algorithme, il est essentiel de produire exactement les mêmes résultats autant pour la version parallèle que pour la version séquentielle. Tous nos résultats du calcul parallèle vérifient cette condition. Nous nous concentrons donc à la

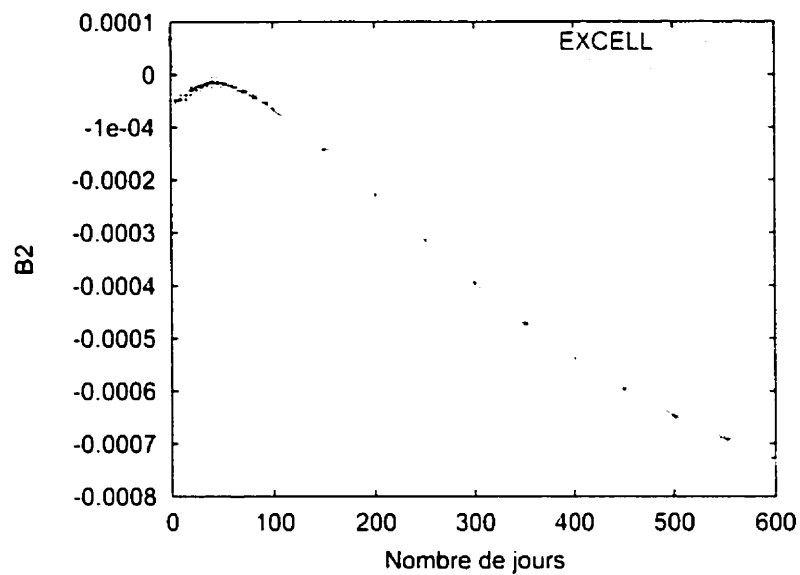


(a) BCAINT

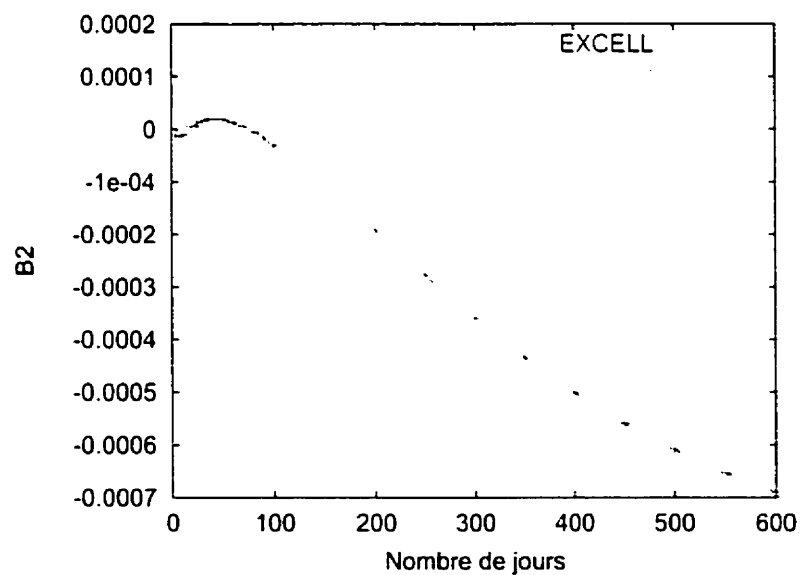


(b) BCAOUT

Figure 4.3 Laplacien géométrique pour le calcul de *burnup* pour les six type de barre de compensation

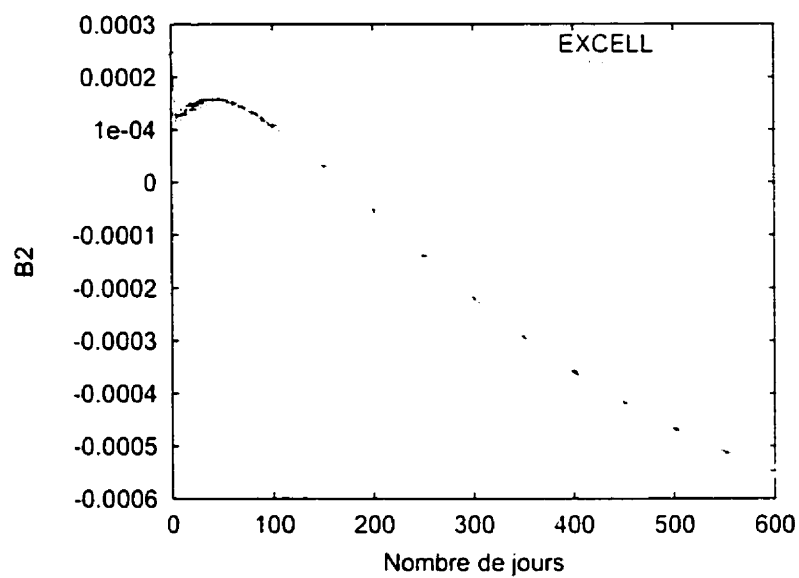


(c) BCBINT

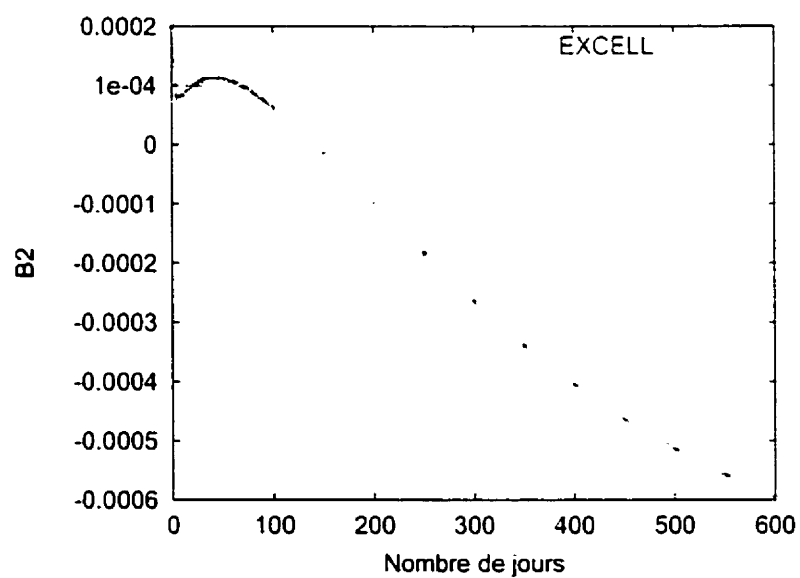


(d) BCCINT

Figure 4.3 Laplacien géométrique pour le calcul de *burnup* pour les six type de barre de compensation (suite)



(e) BCCOUT



(f) BCDINT

Figure 4.3 Laplacien géométrique pour le calcul de *burnup* pour les six type de barre de compensation (suite et fin)

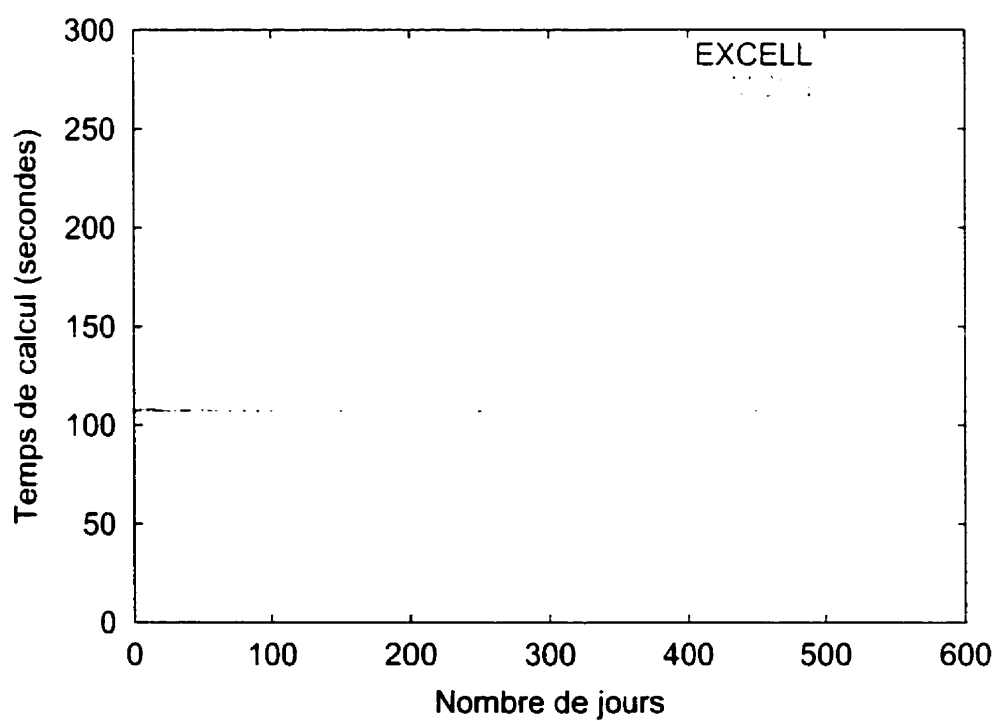


Figure 4.4 Temps de calcul moyen pour chaque période de séjour durant un calcul de *burnup* des barres de compensation

performance, dans cette section, de la parallélisation du module MCI.

Il va sans dire qu'il vaut mieux tester un algorithme parallèle sur un réseau dédié, les résultats obtenus reflètent alors bien la performance de l'algorithme dans le type de réseau sur lequel les tests sont effectués. Mais, malheureusement, nous n'avons pas accès à ce genre de réseaux. Le réseau sur lequel nous avons effectués nos tests est un réseau Ethernet qui dispose d'une quarantaine d'ordinateurs de type Pentium-III cadencés entre 400 Mhz et 450 Mhz. Le réseau est ouvert à tous les étudiants du premier cycle du département informatique de l'École Polytechnique de Montréal. Afin de rendre les processeurs de la machine virtuelle PVM uniformes, lors de son démarrage, seulement les ordinateurs cadencés à 450 Mhz sont sélectionnés.

Nous avons seulement testé l'option parallèle du module MCI pour la barre de compensation BCALNT sur le maillage normal. Nous avons choisi EQ<sub>4</sub> pour la quadrature angulaire et nous avons fait varier la densité des lignes entre 2.5 lignes/cm<sup>2</sup> et 10.0 lignes/cm<sup>2</sup>. Nous avons répété tous les calculs en utilisant 1, 2, 3, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16 et 24 processeurs. Comme nous pensons que le module MCI n'a pas à traiter les lignes d'intégration, la génération, le fusionnement, le tri et la distribution des lignes ne sont pas pris en compte dans l'analyse de la performance du module MCI. Ainsi, sur chaque processeur, dès le début de son exécution, le module MCI dispose déjà de toutes les lignes qui lui sont distribuées, peu importe qu'elles soient originales, fusionnées ou triées. Le temps de machine utilisé par le module MCI compte seulement le temps de calcul itératif sur son processeur et le temps de communication avec d'autres processeurs.

Les calculs ont été faits pendant la période des fêtes et pendant la nuit pour éviter le conflit avec d'autres utilisateurs du réseau. Malgré tous nos efforts, pendant la période de nos calculs, il a pu y avoir, à notre insu, d'autres utilisateurs sur le réseau, plus spécifiquement, sur un ou plusieurs ordinateurs composants de notre

machine virtuelle PVM. Ainsi, certains calculs ont été repris car ils avaient été très perturbés durant la période de leur calcul.

Avant de procéder à l'analyse de la performance du module MCI en parallèle, nous montrons tout d'abord le nombre moyen de lignes utilisés par un processeur. Un processeur est dit actif dans un calcul s'il prend la charge d'une partie de ce dernier. Dans le tableau 4.25, lorsqu'il y a un seul processeur actif, les trois nombres de lignes correspondent, pour chaque densité de lignes spécifiée, au nombre total des lignes originales, des lignes fusionnées au premier niveau et des lignes fusionnées au deuxième niveau respectivement. Les nombres de lignes pour plusieurs processeurs actifs sont seulement ceux d'un seul processeur actif divisés par le nombre de processeurs actifs. Plus les processeurs actifs sont nombreux, moins il y a de lignes par processeur. Pour vingt-quatre processeurs actifs, il y a seulement entre deux cents et trois cents lignes par processeur lorsque les lignes sont fusionnées au deuxième niveau. Il ne sera donc pas étonnant de percevoir une chute de performance quand un trop grand nombre de processeurs seront utilisés, puisque le temps de communication, qui augmente avec le nombre de processeurs actifs, deviendra dominant. Il existe donc un nombre optimal de processeurs actifs tel que, au dessus duquel, un plus nombre de processeurs n'apportent pas nécessairement plus de performance, au contraire, un trop grand nombre de processeurs pourrait nuire à la performance. Le nombre optimal de processeurs actifs peut dépendre du nombre de lignes utilisées. Nous allons expliquer, par un contre-exemple, que ce nombre optimal peut aussi dépendre l'infrastructure du réseau.

De la figure 4.5 à la figure 4.7, nous illustrons le temps de calcul utilisé par le module MCI et le facteur de speedup en fonction du nombre de processeurs actifs lors du calcul d'une barre de compensation de type BCAINT. Bien que, pour le même calcul, le temps machine varie très peu d'un processeur à l'autre, il faut en choisir un pour générer les figures. Comme il y a seulement un processeur parent

Tableau 4.25 Nombre moyen de lignes utilisées par processeur

Densité lignes/cm <sup>2</sup>	Type de lignes	Nombre de processeurs actifs			
		1	8	16	24
2.5	Originales	68391	8548	4274	2849
	TMT-1	29446	3680	1840	1226
	TMT-2	5703	712	356	237
4.0	Originales	109751	13718	6859	4572
	TMT-1	39979	4997	2498	1665
	TMT-2	6288	786	393	262
10.0	Originales	275262	34407	17203	11469
	TMT-1	69801	8725	4362	2908
	TMT-2	7092	886	443	295

qui démarre tous les autres processeurs, appelés processeurs enfants, nous avons utilisé le temps machine du processeur parent.

Les figures 4.5, 4.6 et 4.7 correspondent à trois densités de lignes: 2.5 lignes/cm<sup>2</sup>, 4.0 lignes/cm<sup>2</sup> et 10.0 lignes/cm<sup>2</sup> respectivement. Chacune des trois figures comprend six courbes. Dans chacune des trois figures 4.5 à 4.7, les courbes (a) et (b) correspondent à l'utilisation des lignes originales dans le calcul; les courbes (c) et (d) correspondent à l'utilisation des lignes fusionnées au premier niveau; les courbes (e) et (f) correspondent à l'utilisation des lignes fusionnées au deuxième niveau; les courbes (a), (c) et (e) montrent le temps de calcul tandis que les courbes (b), (d) et (f) montre le facteur de *speedup*. Dans les courbes (b), (d) et (f), nous avons aussi tracé la ligne  $y = x$  qui est le borne supérieur théorique du facteur de *speedup*.

Bien qu'il soit possible d'implanter l'option MCRB aussi pour les lignes fusionnés au premier niveau, il est seulement implantée pour les lignes originales. Car, comme nous l'avons expliqué auparavant, le fusionnement au premier niveau peut donner des lignes virtuelles, de sorte que la notion de macrobande perd son sens physique sur les lignes virtuelles.



En utilisant la quadrature  $EQ_4$ , nous n'avons que trois directions dans une géométrie symétrique en trois dimensions. Par conséquent, l'option ANGL est seulement utilisable sur trois processeurs d'où vient la rigidité de cette option. Il est possible de généraliser l'option ANGL en la mariant avec les options SPLT ou STRD. Dans ce cas là, les lignes dans chaque direction sont regroupées de sorte que  $N_d \times n$  processeurs pourront être utilisés pour un calcul utilisant  $N_d$  directions. Mais la rigidité, quoique moindre que l'option ANGL seule, persiste encore.

Dans les figures 4.5(a) et 4.5(b), nous pouvons constater que le nombre optimal de processeurs actifs pour le calcul du problème à 2.5 lignes/cm<sup>2</sup> sans fusionnement de lignes est autour de 10. À dix processeurs, nous observons un facteur speedup au dessus de 7 pour les trois options MCRB, SPLT et STRD. En bas de dix processeurs, ces trois options ont un comportement semblable qui est le suivant. Pour deux ou trois processeurs, toutes les quatre options suivent bien la ligne  $y = x$ . Graduellement, plus le nombre de processeurs augmente, plus le facteur speedup dévie de  $y = x$  (sauf pour l'option ANGL qui n'est disponible que pour trois processeurs pour le calcul en question). Ce phénomène est tout à fait normal dans le domaine du calcul parallèle, car plus de processeurs signifie généralement moins de travail par processeur et plus de communication. Plus le rapport entre le temps de communication et le temps de calcul est élevé, plus le facteur speedup s'éloigne de la ligne idéale  $y = x$ . Nous constatons aussi que c'est l'option STRD qui a le meilleur speedup et que c'est l'option SPLT qui a le moins bon. Par contre, quand le nombre de processeurs actifs augmente au dessus du nombre optimal, la situation est complètement bouleversée. Premièrement, le facteur speedup se met à baisser quand le nombre de processeurs continue à augmenter, car le temps de communication surpasse le temps de calcul et devient par conséquent dominant. Deuxièmement, nous constatons que c'est le facteur speedup, si nous pouvons encore parler du "*speedup*", de l'option STRD qui baisse le plus rapide-

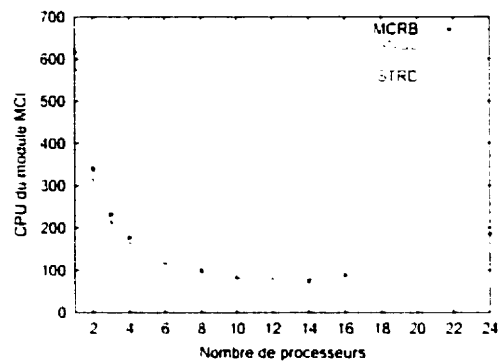
ment parmi les trois. Les phénomènes ci-dessus se répètent dans les autres figures de façon plus ou moins semblable. Dans le pire des cas, quand nous utilisons la technique de fusionnement au deuxième niveau, un calcul parallèle à vingt-quatre processeurs se trouve être plus lent qu'un calcul séquentiel. Nous expliquerons plus tard pourquoi le speedup de l'option STRD baisse plus rapidement que les autres quand nous analyserons la répartition de la charge sur des processeurs. Nous remarquons aussi que plus les lignes sont nombreuses, plus le nombre optimal des processeurs actifs est grand. En utilisant des lignes originales, le nombre optimal de processeurs est 10, 12 et 14 pour les densités de 2.5 lignes/cm<sup>2</sup>, 4.0 lignes/cm<sup>2</sup> et 10.0 lignes/cm<sup>2</sup> respectivement. Tandis que pour les lignes fusionnées au deuxième niveau, le nombre optimal de processeurs décroît à 6, 8 et 8 pour les mêmes densités de lignes respectivement.

Dans les figures 4.5 à 4.7, nous remarquons qu'il manque des points correspondant à certains calculs tels que l'option SPLT à la densité de 4.0 lignes/cm<sup>2</sup> au premier niveau de fusionnement de lignes, l'option STRD à la même densité mais au deuxième niveau de fusionnement des lignes, etc. L'explication est la suivante. Dans le module MCI, séquentiel ou parallèle, nous ne calculons pas sur tous les groupes d'énergie à chaque itération interne, car tous les groupes ne convergent pas à la même vitesse. En fait, à la première itération interne d'une itération externe, nous commençons par calculer sur tous les groupes d'énergie, les flux des différents groupes convergent au fur et à mesure dans les prochaines itérations internes. D'une itération interne à la suivante, nous regardons, de haute énergie en bas énergie, si certains groupes ont convergés. Les groupes convergés de hautes énergies ne seront pas pris en compte dans la prochaine itération interne. L'approche parallèle ne change pas le calcul à entreprendre, mais elle change vraiment l'ordre de calcul. Bien que l'ordre de calcul ne doit pas affecter les résultats en mathématiques, puisqu'il ne s'agit que d'additions, il les affecte plus ou moins en

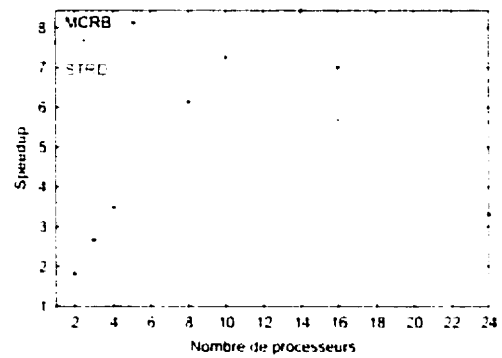
informatique à cause de la limite des machines. Ces genres d'erreurs sont aussi connus par le nom d'erreur de *round point* en informatique. À cause des erreurs de *round point*, le flux, pour un groupe d'énergie, qui se trouve convergé sur un processeur peut ne pas l'être sur un autre processeur pour le même groupe d'énergie. Ainsi, à un moment donné, lorsqu'un conflit du nombre de groupes sur lesquels les processeurs doivent calculer se produit, le calcul s'arrête. Nous avons constaté ce problème dans quelques combinaisons de notre calcul, à force de les reprendre plusieurs fois, certains ont réussi à s'en passer et d'autres non. Heureusement, ce problème apparaît seulement quand le nombre moyen des lignes par processeur est faible.

Bien qu'il soit impossible d'éviter les erreurs de *round point* dans le cadre des calculs numériques, il y a toujours des moyens pour les contourner. Dans notre cas, une solution consiste à calculer sur tous les groupes d'énergie, dans chaque itération interne, une autre consiste à diffuser son numéro de groupe de plus haute énergie. Comme ce problème persiste seulement dans les calculs non intéressants, - il y a trop de processeurs actifs pour avoir une performance adéquate -, nous n'avons pas senti d'urgence pour la corriger lors la rédaction de cette thèse. Par contre, quand la machine virtuelle de PVM est hétérogène et est composée de processeurs de différentes architectures, la considération de ce problème pourra s'avérer importante.

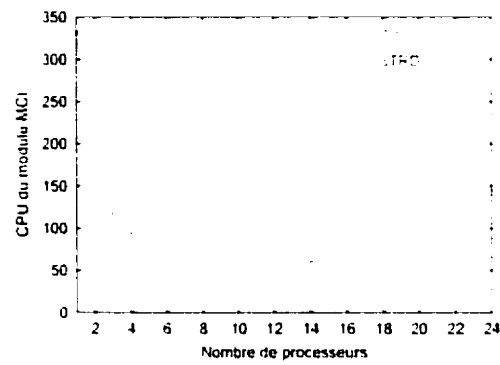
Nous avons vu que, en bas du nombre optimal de processeurs actifs, l'option STRD donne une meilleur performance que les autres options. Ceci est directement lié à l'équilibre de la répartition de la charge. Nous avons aussi vu que, au-dessus du nombre optimal de processeurs actifs, l'option STRD donne généralement une moins bonne performance que les autres options. Ceci est dû à l'infrastructure du réseau.



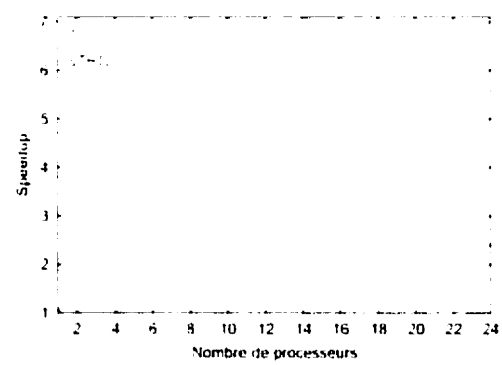
(a) Temps de calcul (lignes originales)



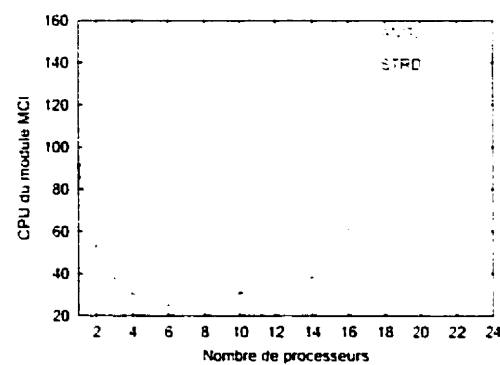
(b) Speedup (lignes originales)



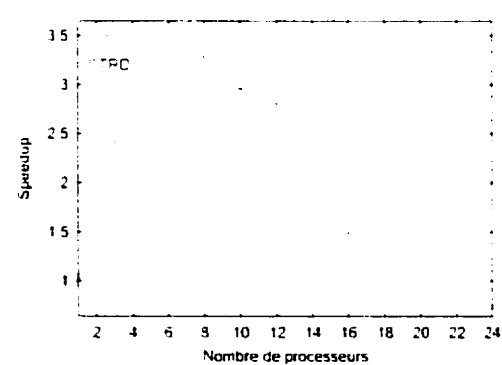
(c) Temps de calcul (TMT 1)



(d) Speedup (TMT 1)

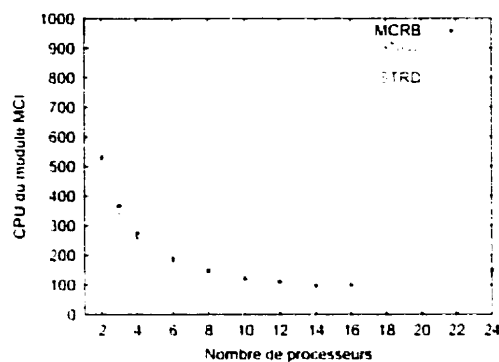


(e) Temps de calcul (TMT 2)

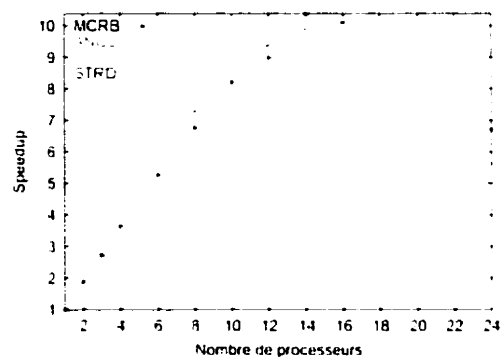


(f) Speedup (TMT 2)

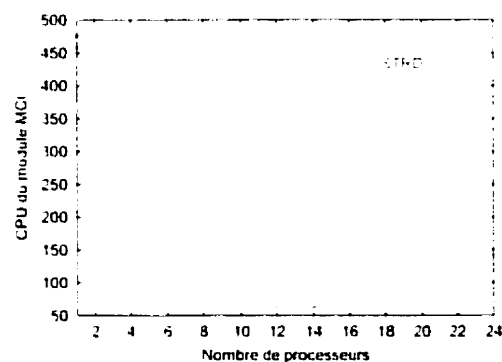
Figure 4.5 Calculs parallèles d'une barre de compensation de type BCAINT sur le maillage normal avec la densité de 2.5 lignes/cm<sup>2</sup>



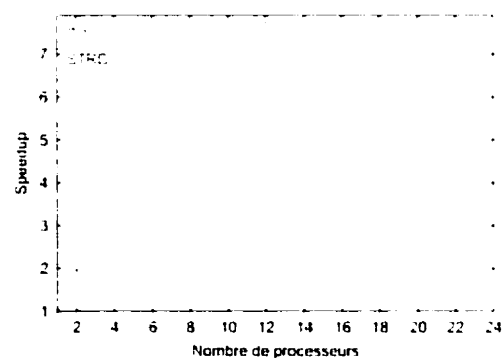
(a) Temps de calcul (lignes originales)



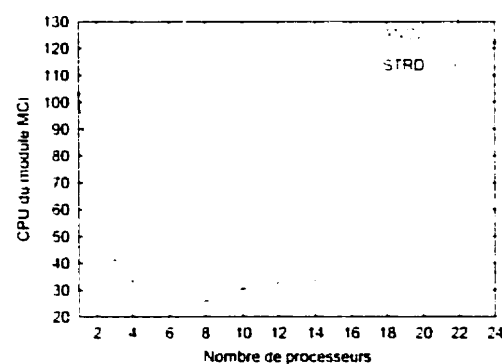
(b) Speedup (lignes originales)



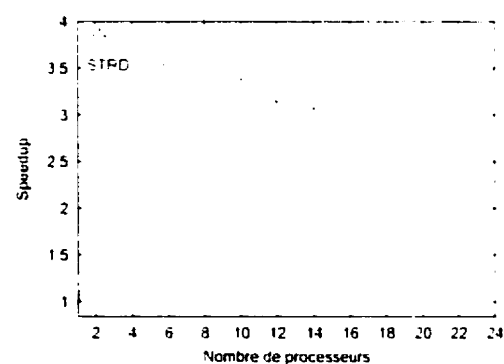
(c) Temps de calcul (TMT 1)



(d) Speedup (TMT 1)

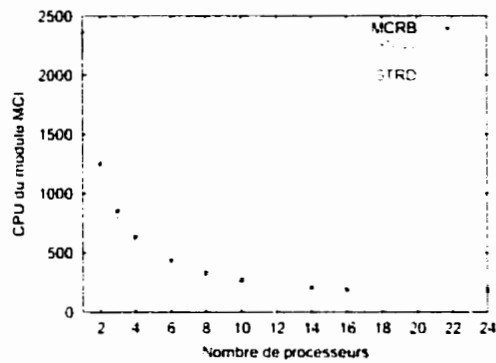


(e) Temps de calcul (TMT 2)

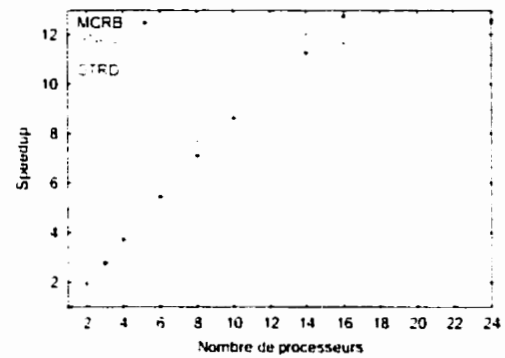


(f) Speedup (TMT 2)

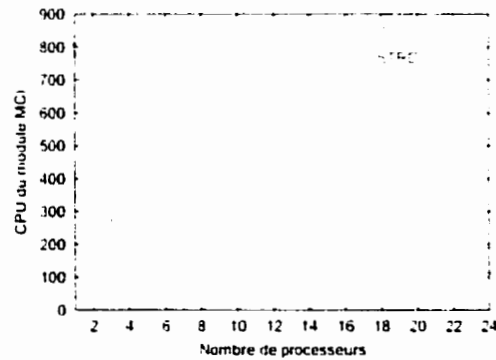
Figure 4.6 Calculs parallèles d'une barre de compensation de type BCAINT sur le maillage normal avec la densité de 4.0 lignes/cm<sup>2</sup>



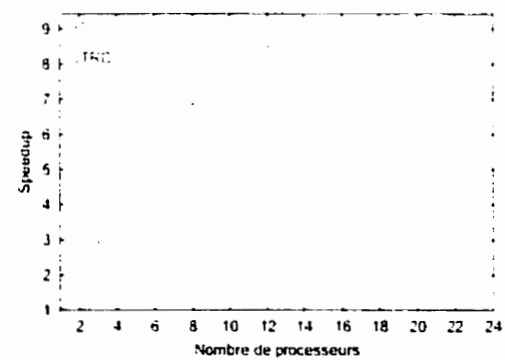
(a) Temps de calcul (lignes originales)



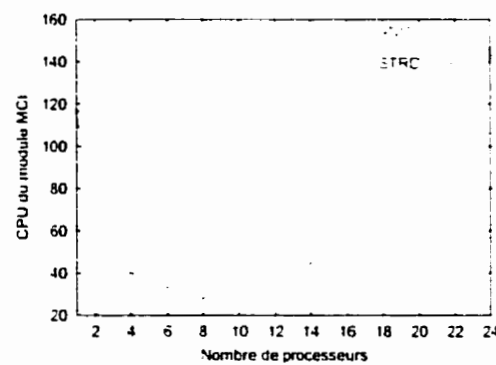
(b) Speedup (lignes originales)



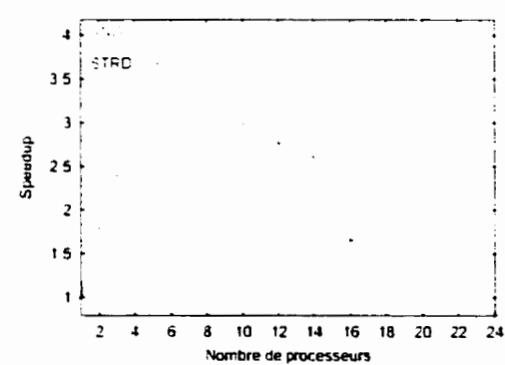
(c) Temps de calcul (TMT 1)



(d) Speedup (TMT 1)



(e) Temps de calcul (TMT 2)



(f) Speedup (TMT 2)

Figure 4.7 Calculs parallèles d'une barre de compensation de type BCAINT sur le maillage normal avec la densité de 10.0 lignes/cm<sup>2</sup>

Pour illustrer l'équilibre de la charge dans un calcul particulier, nous avons mesuré le temps de calcul et le temps de communication pour chaque processeur actif dans le calcul. Prenons comme exemple le calcul à 4.0 lignes/cm<sup>2</sup> à 12 processeurs actifs, car ce dernier est proche du nombre optimal quand les lignes originales sont à utiliser.

Nous commençons par analyser l'option SPLT. Dans les figures 4.8(a) et 4.8(b), le temps de calcul est illustré en rouge et le temps de communication en vert pour chacun des 12 processeurs actifs durant le calcul. En fait le temps de communication comprend le temps de préparation, le temps pour envoyer et le temps pour recevoir des messages de données. Vu que la taille du message est stable, les routines pour préparer et pour envoyer des messages sont non bloquantes dans la machine virtuelle PVM, le temps de préparation d'un message et le temps pour l'envoyer sont stables et prévisibles. Par contre, le temps pour recevoir un message est non prévisible, car la routine utilisée est bloquante. Le temps de calcul dans les figures 4.8(a) et 4.8(b) est tout simplement la différence entre le temps total utilisé par le module MCI et le temps de communication. Il y a quelques secondes de différence sur le temps total, ceci est tout à fait normal parce que les processeurs enfants ne peuvent pas être démarrés en même temps et que tous les processeurs ne reçoivent pas leur message en même temps. Nous remarquons que, dans la figure 4.8(a), le temps de calcul et, par conséquent, le temps de communication varient beaucoup d'un processeur à l'autre. Il y a deux explications possibles pour cela. Premièrement, comme nous sommes sur un réseau non dédié, nous pouvons soupçonner qu'il y a d'autres activités non prévisibles, durant la période de calcul, sur un ou quelques-uns des processeurs actifs de sorte que la charge totale n'est plus équilibrée. Deuxièmement, il se peut que la stratégie de répartition de charge ne soit pas juste elle-même. Elle résultera en une charge non équilibrée même dans un réseau dédié. Cette dernière explication nous semble plus juste que la première

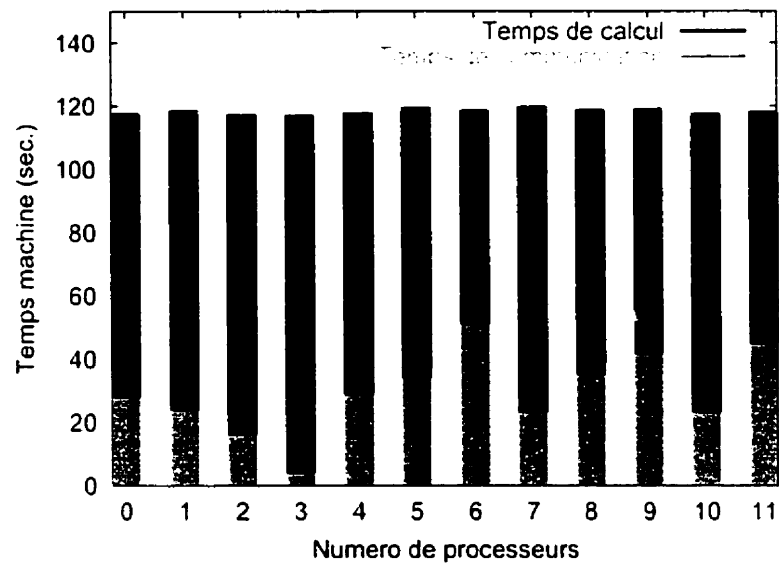
pour les deux raisons suivantes. Nous constatons que ce n'est pas un processeur qui ralentit tous les autres, car il y a une variété de temps de calcul sur des processeurs différents. Comme nous travaillons dans la période où le réseau est le moins chargé, la possibilité qu'il y a plusieurs utilisateurs travaillent dans plusieurs machines est relativement faible. En plus, le problème de charge non équilibrée se répète, de façon régulière, dans d'autres calculs de l'option SPLT. Nous remarquons que la charge est mieux équilibrée dans la figure 4.8(b), qui correspond au fusionnement de lignes au deuxième niveau. En fait, à force de réduire le nombre de lignes utilisées, la différence de charge entre des processeurs, qui est causé principalement par la différence entre le nombre moyen des segments par ligne, puisque chaque processeur a le même nombre de lignes, dans différents processeurs, devient moins important.

Quant à l'option STRD, comme illustrée dans les figures 4.9(a) et 4.9(b), le temps de calcul et le temps de communication sont uniformes pour tous les processeurs, peu importe que les lignes utilisées soient originales ou fusionnées. Il est clair que la stratégie appliquée dans l'option STRD est plus juste que celle pratiquée dans le SPLT. Il n'est donc pas étonnant qu'un calcul utilisant l'option STRD soit plus rapide que le même calcul utilisant l'option SPLT.

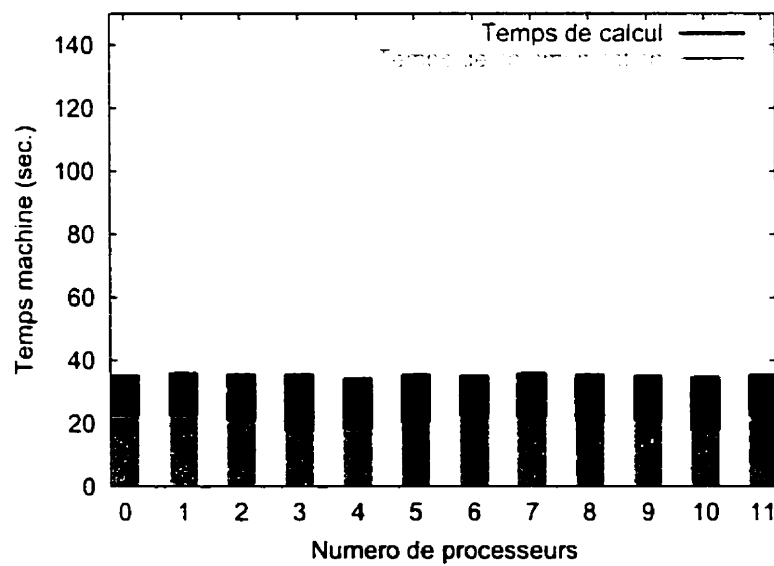
Pour des raisons déjà expliquées auparavant, l'option MCRB est seulement disponible pour les lignes originales. En comparant la figure 4.10 avec les figures 4.8(a) et 4.9(a), nous pouvons conclure que la qualité de la stratégie sur la répartition de charge de l'option MCRB se qualifie entre celle de STRD et celle de SPLT.

Dans les figures 4.11 à 4.13 où le temps de calcul et le temps de communication sont montrés pour vingt-quatre processeurs actifs, nous voyons comment le temps de communication devient dominant par rapport au temps de calcul. Nous remarquons aussi que le temps de communication est très élevé pour l'option STRD.



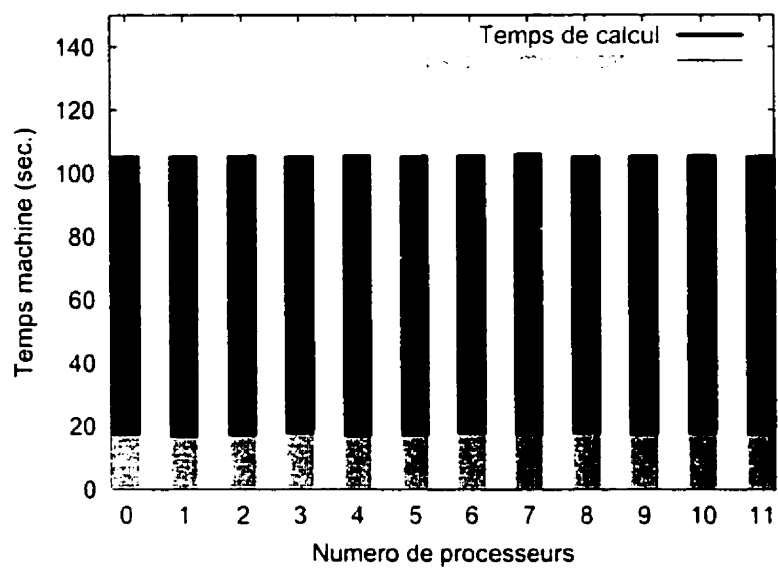


(a) Lignes originales

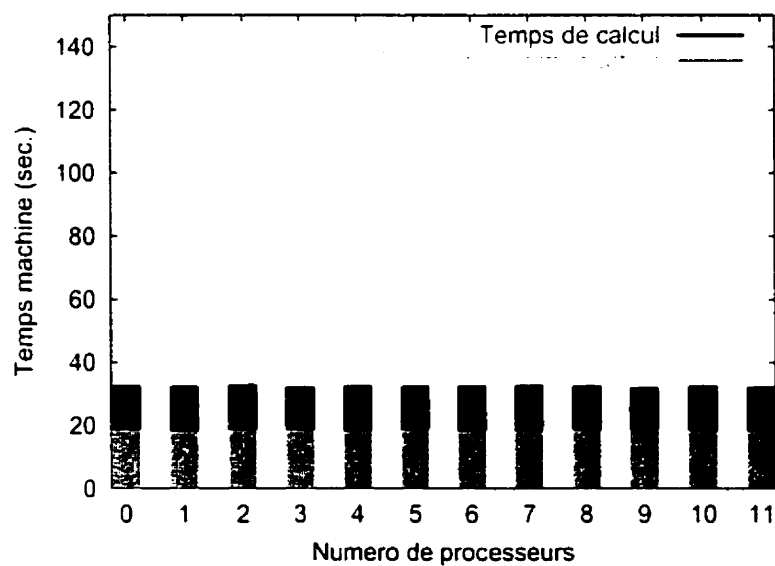


(b) TMT-2

Figure 4.8 Équilibre de la charge pour le calcul parallèle à 12 processeurs avec option SPLT de BCAINT (maillage normal avec la densité de 4.0 lignes/cm<sup>2</sup>)



(a) Lignes originales



(b) TMT-2

Figure 4.9 Équilibre de la charge pour le calcul parallèle à 12 processeurs avec option STRD de BCALNT (maillage normal avec la densité de 4.0 lignes/cm<sup>2</sup>)

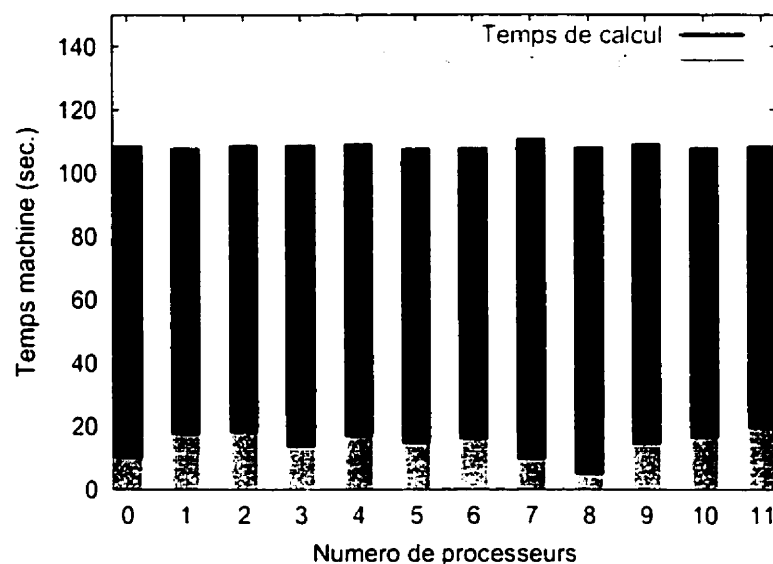


Figure 4.10 Équilibre de la charge pour le calcul parallèle à 12 processeurs avec option MCRB de BCAINT (maillage normal avec la densité de 4.0 lignes/cm<sup>2</sup>, lignes originales)

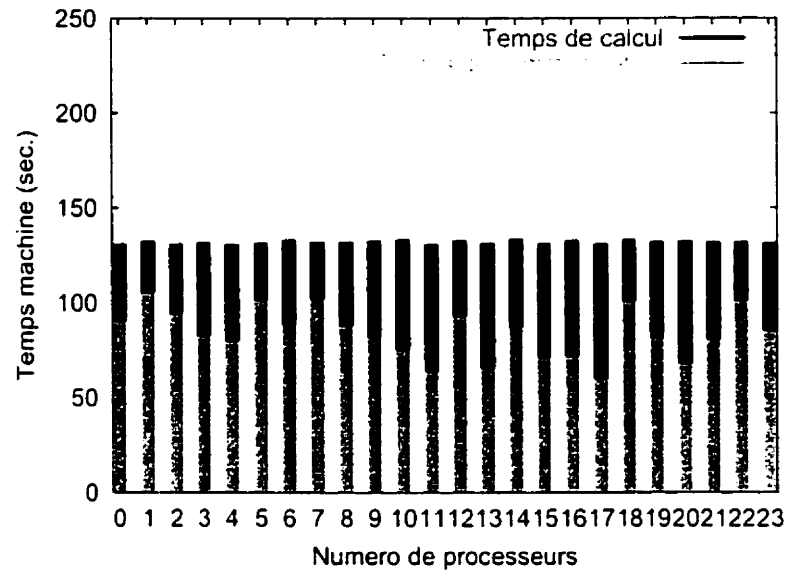
même plus élevé que le temps total pour l'option SPLT. Ceci est dû à l'infrastructure du réseau. Nous avons mentionné que le réseau sur lequel les tests sont réalisés est un réseau Ethernet. Dans un réseau Ethernet, toutes les stations utilisent un seul médium pour la communication entre eux et l'accès au médium est contrôlé par le protocole CSMA/CD (*Carrier-Sense Multiple-Access with Collision Detection*). Ce protocole consiste de deux parties pour permettre une station de transmettre une trame de données. Premièrement, la station ayant des données à transmettre écoute le canal et transmet si ce dernier est libre; sinon elle attend un certain temps avant de réessayer. Deuxièmement, la station qui est en train de transmettre des données arrête la transmission dès qu'une collision est détectée et attend un certain temps avant de recommencer la procédure de transmission. Plus d'information sur le protocole CSMA/CD peut être trouvé ailleurs (HALSALL F., 1995).

Comme l'option STRD applique la meilleure stratégie de répartition de la charge, les

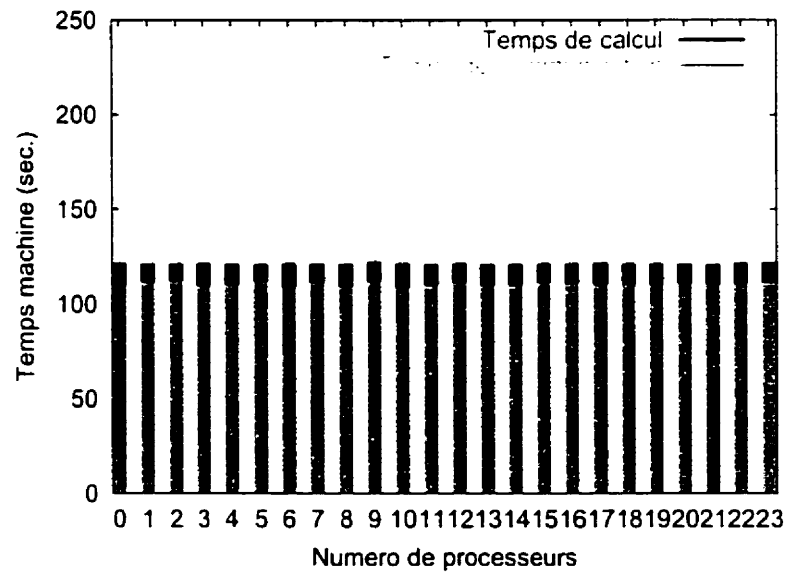
processeurs terminent leur calcul à peu près en même temps et veulent transmettre leur données aussi en même temps. Si les processeurs actifs sont nombreux, la charge sur le médium se trouve très élevée pendant une courte ou plusieurs courtes périodes (vers la fin de chaque itération interne). Nous savons que, à forte charge, l'apparition de nombreuses collisions devient un problème majeur et qu'elle affecte sérieusement la performance du réseau (TANENBAUM A., 1999). Nous arrivons donc à la conclusion suivante: une répartition parfaitement équilibrée n'est pas toujours avantageuse pour toute sorte de réseau. Pour un réseau Ethernet, il est plus avantageux d'avoir une répartition légèrement moins équilibrée afin d'éviter ou de diminuer des collisions lors de la transmission des données. Il est possible de le faire en ajustant finement la charge sur chaque processeur lors de la distribution des lignes.

Dans la figure 4.14, l'évolution du temps de communication par rapport au nombre de processeurs actifs est montrée pour les trois options de calcul: MCRB, SPLT et STRD. Nous avons utilisé le maximum des temps de communication parmi tous les processeurs actifs. Le temps de communication augmente graduellement pour l'option STRD, tandis qu'il atteint son maximum à deux et trois processeurs actifs pour les options SPLT et MCRB respectivement. Les valeurs extrêmes de temps de communication sont causées par une répartition de charge non équilibrée. Plus les processeurs actifs sont nombreux, moins la différence de charge est significative.

Sur le réseau où sont effectués les tests et dans la phase de développement actuelle, l'option MCRB n'a pas montré une meilleure performance par rapport à d'autres options utilisées dans les calculs présentés auparavant. Mais le potentiel du concept macrobande reste très intéressant pour une procédure intelligente de génération automatique de lignes et, aussi, pour des calculs sur des machines vectorielles.

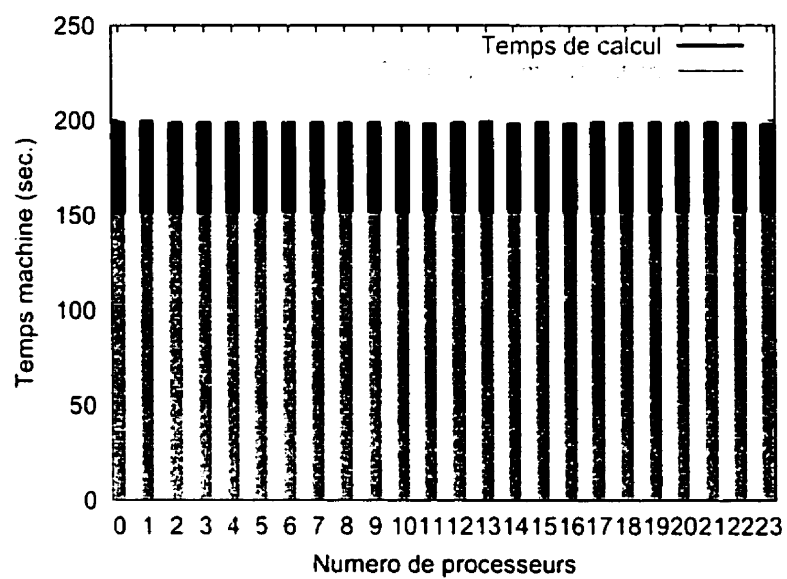


(a) Lignes originales

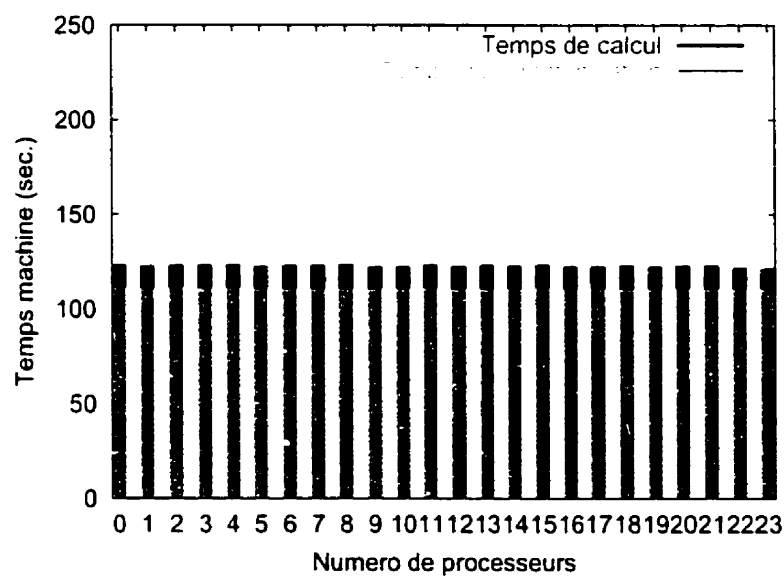


(b) TMT-2

Figure 4.11 Équilibre de la charge pour le calcul parallèle à 24 processeurs avec option SPLT de BCAINT (maillage normal avec la densité de 4.0 lignes/cm<sup>2</sup>)



(a) Lignes originales



(b) TMT-2

Figure 4.12 Équilibre de la charge pour le calcul parallèle à 24 processeurs avec option STRD de BCAlNT (maillage normal avec la densité de 4.0 lignes/cm<sup>2</sup>)

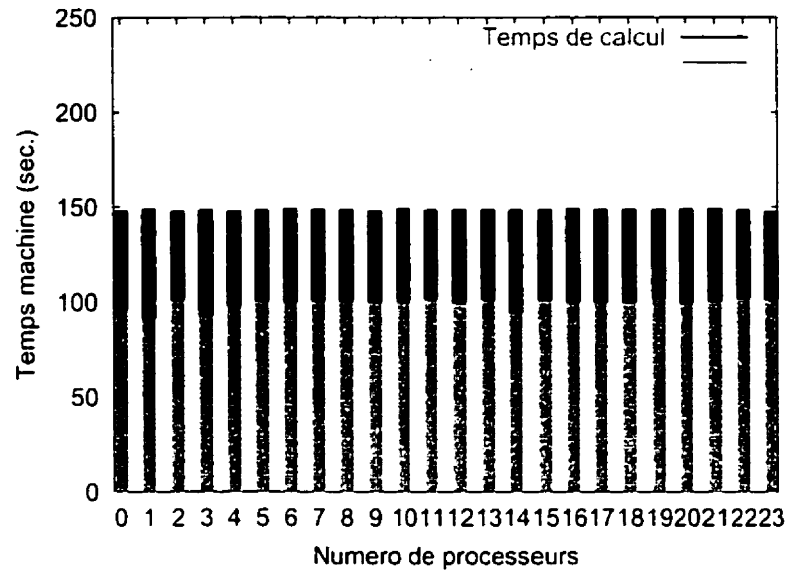


Figure 4.13 Équilibre de la charge pour le calcul parallèle à 24 processeurs avec option MCRB de BCAINT (maillage normal avec la densité de 4.0 lignes/cm<sup>2</sup>, lignes originales)

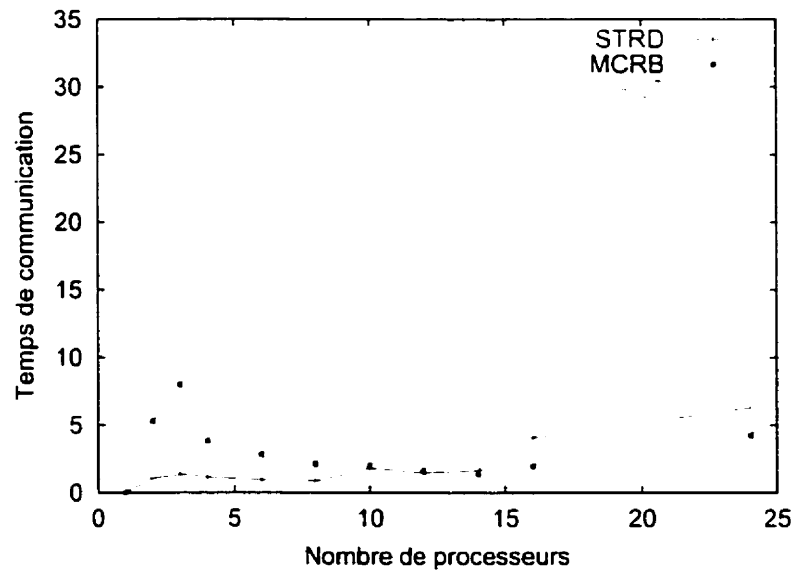


Figure 4.14 Évolution du temps de communication par rapport au nombre de processeurs actifs pour le calcul parallèle de BCAINT. (maillage normal avec la densité de 4.0 lignes/cm<sup>2</sup>, lignes originales)

### 4.3 Barres liquides de G2

Nous avons aussi testé notre module MCI sur les calculs de  $\Delta\Sigma$  des barres liquides. Dans le réacteur G2, il y a 14 zones de contrôles et il y a une barre liquide dans chaque zone. Les barres liquides contiennent de l'eau légère, absorbante par rapport à l'eau lourde du modérateur et du caloporteur. Leur niveau varie continuellement afin de maintenir constantes la puissance globale du réacteur de même que les puissances individuelles des zones. Les barres liquides disposent de tubes d'alimentation et de tubes de vidange dont le nombre varie selon leur placement dans le réacteur. Selon le nombre des tubes, nous avons trois types de barres liquides:

- Type 10: avec un tube de vidange et aucun tube d'alimentation:
- Type 21: avec deux tubes de vidange et un tube d'alimentation:
- Type 32: avec trois tubes de vidange et deux tubes d'alimentation.

Une cylindrisation en six régions a été effectuée, car le module EXCELT ne peut pas traiter des cylindres imbriqués à moins qu'ils soient concentriques. La région centrale et la cinquième région peuvent être vides ou remplies d'eau.

A cause de la complexité géométrique des barres liquides, une quadrature angulaire  $EQ_6$  et une densité de 10.0 lignes/cm<sup>2</sup> sur le plan perpendiculaire étaient nécessaires pour les calculs des barres liquides. Un maillage raffiné est aussi disponible où la quadrature  $EQ_6$  accompagnant de la densité 10.0 lignes/cm<sup>2</sup> s'avère nécessaire.

La procédure de calcul est similaire à celle pour les barres de compensation. Nous avons choisi de comparer l'option MCI-a au module EXCELL de DRAGON. L'option MCI-a utilise des lignes fusionnées au première niveau et l'approximation par interprétation pour des fonctions exponentielles, alors que le module EXCELL utilise des lignes originales et évalue la fonction exponentielle de façon exacte à la limite de l'ordinateur. Les résultats sont montrés dans Table 4.27 (Rempli d'eau)



et Table 4.26 (Vide d'eau). Nous remarquons que les résultats de MCI sont hautement cohérents aux résultats de EXCELL autant pour le maillage normal que pour le maillage raffiné. Par contre, la différence entre les résultats du maillage normal et ceux du maillage raffiné se trouve généreusement plus élevée pour les barres liquides que pour les barres de compensations.

Il y a une exception dans le tableau 4.26. Pour le maillage raffiné, la différence, entre EXCELL et MCI-a, de la valeur de  $\Delta\Sigma_a^1$  de la barre liquide type 32 se révèle à 68%. En fait, les résultats du module EXCELL pour le maillage raffiné proviennent du calcul sur un ordinateur AIX tandis que les autres proviennent des calculs sur des ordinateurs de type Pentium. Ensuite, la valeur de  $\Delta\Sigma_a^1$  est  $10^5$  fois plus petite que celle de  $\Delta\Sigma^1$  pour la barre liquide en question. Nous pouvons donc conclure que cette différence est causée par des erreurs de *round point* sur des architectures d'ordinateurs différents.

Un autre aspect intéressant de la méthode des caractéristiques concerne l'utilisation des mémoires physiques. Pour le maillage normal, correspondant aux 48 régions et 36 surfaces, la méthode des probabilités de collision (EXCELL) nécessite deux fois plus de mémoire physique que la méthode des caractéristiques (MCI-a). Pour le maillage raffiné, correspondant aux 304 régions et 126 surfaces, le module EXCELL utilise 134 Mo mémoire alors que le module MCI n'en utilise que 7.9 Mo.

#### 4.4 Coefficient de Doppler

Le coefficient de Doppler de la réactivité a été analysé au niveau cellulaire en 2D (MOSTELLER R. D. et al., 1991). La géométrie d'une cellule PWR est illustrée dans la figure 4.15.

La cellule a une longueur de 1.2609 cm avec un rayon extérieur de 0.45802 cm

Tableau 4.26 Valeurs de  $\Delta\Sigma$  pour les barres liquide (vide)

Type de $\Delta\Sigma$	Maillage raffiné		Maillage normal	
	MCI-a (réf.)	EXCELL (%)	MCI-a (%)	EXCELL (%)
$\Delta\Sigma^1$	-1.0171E-02	0.01	-0.12	-0.06
	-7.6870E-03	0.02	0.53	0.65
	-5.5628E-03	0.04	1.13	1.34
$\Delta\Sigma_a^1$	-7.7195E-06	0.42	-27.17	-26.21
	-3.6455E-06	0.60	-44.50	-43.02
	-1.2107E-08	68.27	-6.09	-9.08
$\Delta\Sigma_{s0}^{11}$	-9.7940E-03	0.01	-0.14	-0.08
	-7.4590E-03	0.02	0.51	0.62
	-5.4628E-03	0.04	1.09	1.29
$\Delta\Sigma_{s0}^{12}$	7.8452E-08	-0.13	0.88	0.69
	5.1810E-08	-0.15	-1.72	-1.85
	2.9666E-08	-0.13	-7.84	-7.58
$\Delta\Sigma^2$	-1.5884E-02	-0.06	0.18	0.13
	-9.5409E-03	-0.06	-0.13	-0.19
	-3.0355E-03	-0.06	-1.74	-1.83
$\Delta\Sigma_a^2$	2.3345E-05	-0.34	-14.97	-15.15
	6.4836E-05	-0.13	-4.97	-5.04
	1.0655E-04	-0.08	-2.37	-2.41
$\Delta\Sigma_{s0}^{21}$	-3.6930E-04	0.01	0.92	0.97
	-2.2436E-04	0.05	2.15	2.36
	-9.9982E-05	0.19	4.67	5.37
$\Delta\Sigma_{s0}^{22}$	-1.5907E-02	-0.06	0.16	0.11
	-9.6058E-03	-0.06	-0.16	-0.22
	-3.1421E-03	-0.06	-1.76	-1.85

Tableau 4.27 Valeurs de  $\Delta\Sigma$  pour les barres liquide (rempli d'eau)

Type de $\Delta\Sigma$	Maillage raffiné		Maillage normal	
	MCI-a (réf.)	EXCELL (%)	MCI-a (%)	EXCELL (%)
$\Delta\Sigma^1$	1.9235E-02	-0.03	3.65	3.59
	1.6578E-02	-0.03	4.04	3.98
	1.4257E-02	-0.03	4.26	4.22
$\Delta\Sigma_a^1$	3.4321E-05	0.25	-21.52	-21.16
	2.9920E-05	0.24	-21.69	-21.26
	2.5960E-05	0.26	-21.28	-20.81
$\Delta\Sigma_{s0}^{11}$	1.7961E-02	-0.03	3.56	3.51
	1.5471E-02	-0.03	3.96	3.90
	1.3297E-02	-0.03	4.20	4.16
$\Delta\Sigma_{s0}^{12}$	-1.5660E-07	-0.14	24.18	23.21
	-1.3133E-07	-0.14	24.18	23.70
	-1.1000E-07	-0.20	23.92	23.42
$\Delta\Sigma^2$	1.0735E-01	-0.09	3.91	3.78
	9.6946E-02	-0.08	3.72	3.71
	8.6274E-02	-0.01	3.57	3.48
$\Delta\Sigma_a^2$	6.1410E-04	-0.08	5.19	5.06
	5.5316E-04	-0.07	5.15	5.03
	4.9135E-04	-0.01	5.11	5.01
$\Delta\Sigma_{s0}^{21}$	1.2398E-03	-0.06	5.58	5.45
	1.0773E-03	-0.06	5.85	5.72
	9.3357E-04	-0.04	5.93	5.82
$\Delta\Sigma_{s0}^{22}$	1.0674E-01	-0.09	3.90	3.78
	9.6393E-02	-0.07	3.72	3.59
	8.5783E-02	-0.01	3.56	3.47

Tableau 4.28 Comparaison de mémoire alloué entre module EXCELL et module MCI

Maillage utilisé	Nombre de		Mémoire Alloué (Mo)	
	Régions	Surfaces	MCI-a	EXCELL
Maillage Normal	48	36	4.0 Mo	7.9 Mo
Maillage Raffiné	304	126	7.8 Mo	134.1 Mo

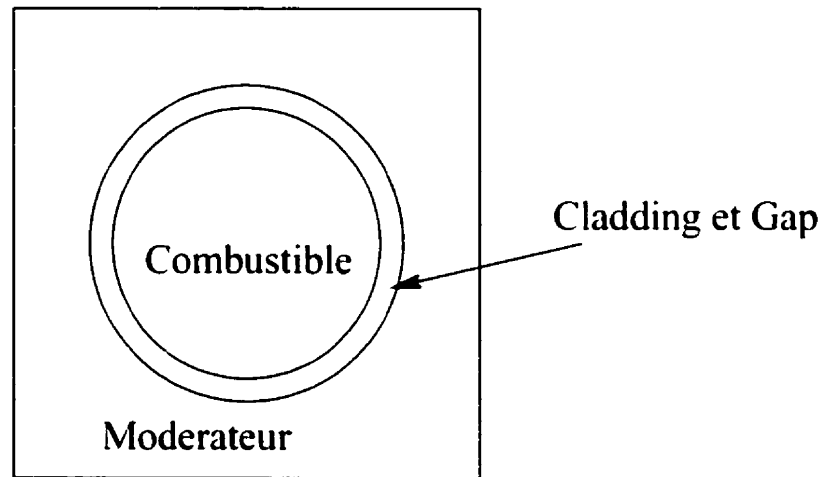


Figure 4.15 Géométrie d'une cellule PWR

pour la gaine et un rayon de 0.39306 cm pour le combustible. Cinq différents enrichissements du combustible, 0.711 (Uranium naturel), 1.6, 2.4, 3.1 et 3.9 wt%, ont été étudiés et chacun à deux températures de combustible, 600K (HZP) et 900K (HFP). Les températures de la gaine et du modérateur sont fixées à 600K dans tous les cas. En utilisant la librairie ENDF/B-V à 89 groupes, nous avons généré les sections efficaces d'auto-protection avec le module SHI en utilisant une correction Livolant-Jeanpierre (MARLEAU G. and HÉBERT A., 1997).

Nous avons élargi la troisième dimension du benchmark à 1 cm de hauteur avec la réflexion isotropique comme conditions aux limites. Les résultats du tableau 4.29 correspondent à la quadrature  $EQ_6$  et à la densité de 160.0 lignes/cm<sup>2</sup>. Nous avons utilisé les lignes originales et l'évaluation exacte de la fonction exponentielle, ce qui correspond à l'option MCI-f. Le maximum de la différence absolue entre MCI-f et EXCELL est  $5 \times 10^{-5}$  dans le tableau 4.29, ce qui confirme numériquement l'équivalence des méthodes des caractéristiques et des probabilités de collision. En utilisant une option moins rigoureuse dans le module MCI, comme l'option MCI-a, la différence des résultats se trouve augmentée légèrement dont le maximum

Tableau 4.29 Valeurs propres obtenues par MCI et EXCELL

Fuel Enrichment (wt%)	Fuel Temperature (K)	MCI-f	MCI-a	EXCELL
0.711	600	0.66945	0.66930	0.66945
	900	0.66169	0.66152	0.66169
1.6	600	0.96537	0.96536	0.96542
	900	0.95538	0.95533	0.95542
2.4	600	1.10377	1.10379	1.10382
	900	1.09309	1.09306	1.09314
3.1	600	1.18197	1.19198	1.18202
	900	1.17101	1.17096	1.17105
3.9	600	1.24532	1.24530	1.24536
	900	1.23376	1.23367	1.23379

constatée est  $17 \times 10^{-5}$ .

## CONCLUSION

L'objectif de ce travail a été de construire une nouvelle méthode de calcul, plus précisément une méthode tridimensionnelle des caractéristiques basée sur l'isotropie du choc, pour déterminer les incréments de sections efficaces essentiels associés aux mécanismes de réactivité dans les réacteurs de type CANDU.

Un module, nommé MCI, a été développé pour réaliser cette méthode des caractéristiques dans le code DRAGON. La procédure d'utilisation de MCI fait aussi appel au module EXCELT pour générer des lignes d'intégration selon la procédure conventionnelle, c.-à-d. en utilisant la quadrature  $EQ_V$  et en générant les lignes uniformément. La géométrie considérée est tridimensionnelle de type mixte, cartésienne et cylindrique, et les conditions limites de réflexion isotrope sont utilisées. Nous avons montré que la méthode des caractéristiques est équivalente, pour un domaine fini, à la méthode des probabilités de collision. Cette dernière est pratiquée par le module EXCELL du code DRAGON. En utilisant les mêmes lignes d'intégration dans des calculs de MCI et de EXCELL, nous avons obtenu des résultats qui confirment aussi numériquement l'équivalence des deux méthodes.

Basé sur l'équivalence entre la méthode des caractéristiques et la méthode des probabilités de collision, nous avons développé une méthode d'accélération, nommé la technique SCR (*Self-Collision Rebalancing*). Pour chaque région, la technique SCR calcule la probabilité qu'un neutron dans la région subisse sa première collision dans la même région. Pour une région à la frontière, la probabilité de fuite est aussi prise en compte pour chacune des surfaces exposées. À la fin d'une itération interne, une procédure de rebalancement des sources est effectuée à l'intérieur de chaque région en utilisant les probabilités d'auto-collision. Ceci a pour effet d'accélérer le ralentissement des neutrons rapides, et la convergence se trouve donc plus ra-

pide. L'utilisation de la technique SCR est jumelée à la technique d'accélération variationnelle à un paramètre pour offrir une meilleure performance.

Nous avons aussi développé la technique des fusionnements des lignes et nous l'avons généralisé à deux niveaux (TMT: *Tracks Merging Technique*). Le fusionnement au premier niveau (TMT-1) considère les lignes uniformément générées par le module EXCELT, tel quel, et fusionnent seulement les lignes voisines. L'avantage de TMT-1 repose sur l'économie de la mémoire physique. Le fusionnement au deuxième niveau (TMT-2) consiste à ajouter une procédure de tri sur les lignes originales avant de les fusionner. Le TMT-2 permet un fusionnement maximum, le temps utilisé pour le calcul itératif, qui dépend du nombre de lignes utilisées, se trouve minimisé. Le TMT-2 donne des résultats très précis avec un nombre de lignes modéré. L'inconvénient de TMT-2 vient de l'utilisation massive de la mémoire physique et du temps de calcul important dans la procédure de tri. Quand le fichier des lignes d'intégration est de grande taille et que l'ordinateur ne dispose pas assez de mémoire, la procédure de tri recourt à la mémoire virtuelle et le gain sur la réduction du nombre de lignes peut être renversé.

Nous avons également développé la possibilité du calcul parallèle dans le module MCI. Deux catégories de stratégie de parallélisation ont été expérimentées: parallélisation par lignes et parallélisation par macrobandes. La première consiste à diviser les lignes d'intégration en lots et chaque processeur fait son calcul sur un lot qui lui est destiné. Dans la deuxième stratégie, la plus petite unité dans la stratégie de répartition de charge est une macrobande. La charge sur un processeur est alors évaluée en nombre de segments de toutes les macrobandes qui lui sont destinées. Ces deux stratégies sont toutes très souples quant au nombre de processeurs utilisés et permettent toutes deux de balancer facilement la répartition de charge.

Dans la catégorie de parallélisation par lignes, trois options sont disponibles dans

le module MCI: ANGL, SPLT et STRD. La parallélisation par macrobandes peut être activée en choisissant la quatrième option, soit l'option MCRB. L'option ANGL est la plus restreinte des quatre, elle est utilisable seulement quand le nombre de directions est égal au nombre de processeurs. Les options ANGL, SPLT et STRD peuvent toutes être jumelées au fusionnement des lignes pour les deux niveaux. Bien que l'option STRD se trouve à être la mieux équilibrée parmi les trois, les performances observées sont relativement comparables pour les options SPLT, STRD et MCRB sur le réseau Ethernet où nous avons effectué nos tests. Il semble avantageux de déséquilibrer, volontairement et légèrement, la charge sur les processeurs actifs dans certaines architectures de réseau, le réseau Ethernet par exemple, afin de diminuer les collisions de communication lors de la transmission des données.

De nos résultats, l'option MCRB n'a pas démontré beaucoup de gain de performance par rapport aux autres, mais cela est dû, premièrement, à une procédure de traçage des lignes non appropriée à l'usage de macrobande, et deuxièmement au manque de ressources en machines vectorielles.

Par contre, l'option MCRB permet de diviser une géométrie tridimensionnelle en macrobandes, i.e. des géométries plus simples. Chaque processeur génère des lignes d'intégration sur un lot de macrobandes et d'y faire le calcul. La grandeur du problème est ainsi diminué pour chaque processeur. Comme la géométrie complète est seulement traitée lors de la génération des macrobandes, le goulot d'étranglement pourra être moins significatif pour l'option MCRB que pour d'autres options. Nous croyons que l'avenir de l'utilisation de macrobande dans la résolution de l'équation du transport est très prometteur pour les géométries tridimensionnelles complexes.

Dans le cadre du calcul neutronique, la possibilité d'effectuer des calculs de transport à une échelle plus près du cœur d'un réacteur CANDU permettrait de valider les procédures de calcul et d'homogénéisation couramment utilisées en industrie, et



il semble que, avec des ressources informatiques suffisantes, par exemple les infrastructures de grille de calcul sur réseau élargi, l'avenir nous permette d'atteindre une performance adéquate des solveurs linéaires répartis sur un très grand nombre de processeurs.

## RÉFÉRENCES

- ALCOUFFE R. E. and LARSEN E. W. (1981). A Review of Characteristic Methods used to Solve the Linear Transport Equation. In *Proc. Int. Topl. Mtg. Advances in Mathematical Methods for the Solution of Nuclear Engineering Problems*, volume 1. Munich, Germany, pages 3-16.
- ASKEW J. R. (1972). A Characteristics Formulation of the Neutron Transport Equation in Complicated Geometries. Technical Report AEEW-M 1108, United Kingdom Atomic Energy Establishment.
- BUCHOLZ J. A. and PONCELET C. G. (1977). The Direct-Coupled-Ray Method for Design Oriented Three-Dimensional Transport Analysis. *Nucl. Sci. Eng.*, **64**, 356.
- CARLSON B. G. (1971). Tables of Equal Weight Quadrature  $EQ_N$  over the Unit Sphere. Technical Report LA-4734, Los Alamos National Laboratory.
- CHILDS R. L. and RHOADES W. A. (1993). Theoretical Basis of the Linear Nodal and Linear Characteristic Methods in the TORT Computer Code. Technical Report ORNL/TM-12246.
- FILIPONE W. L. and WOOLF S. (1979). A Streaming Ray Technique for Particle Transport Calculations. *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **33**, 727-729.
- FILIPONE W. L. and WOOLF S. (1981). Application of the Method of Streaming Rays to Particle Transport in Complex Geometries. In *Proc. Int. Topl. Mtg. Advances in Mathematical Methods for the Solution of Nuclear Engineering Problems*, volume 1. Munich, Germany, pages 67-82.

GEIST G. A., K. and PAPADOPOULOS P. M. (1986). PVM and MPI: a Comparison of Features. *Calculateurs Paralleles*. **8**.

GEORGE I. B. and GLASSTONE S. (1979). *Nuclear Reactor Theory*. Robert E. Krieger Publishing Company.

HALSALL F. (1995). *Data Communications, Computer Networks and Open Systems*. Addison-Wesley Longman Limited, fourth edition.

HALSALL M. J. (1980). CACTUS. A Characteristics Solution to the Neutron Transport Equation in Complicated Geometries. Technical Report AEEW-M 1291. United Kingdom Atomic Energy Establishment.

HALSALL M. J. (1990). The CACTUS Transport Method in WIMS. In *Specialist Meeting on Advanced Computational Methods for Power Reactors*. Cadarache, France.

HALSALL M. J. (1998). WIMS8 - Speed With Accuracy. In *Int. Conf. Physics of Nuclear Science and Technology*. Long Island, pages 103-108.

HÉBERT A. (1985). Variational Principles and Convergence Acceleration Strategies for the Neutron Diffusion Equation. *Nucl. Sci. Eng.*, **91**, 414-427.

HÉBERT A. (1993). A Consistent Technique for the Pin-by-Pin Homogenization of a Pressurized Water Reactor Assembly. *Nucl. Sci. Eng.*, **113**, 227-238.

HONG S. G. and CHO N. Z. (1999). Angular Dependent Rebalance (ADR) Iteration for Discrete-Ordinates Transport Problems in Equilateral Triangular Meshes. In *Mathematics and Computation. Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications*. Madrid, Spain.

KAVENOKY A. and MICHEL-VILLAZ M. (1968). Définition et Calcul du Coefficient de Diffusion des Milieux Multiplicateurs à Neutrons Rapides à Partir d'une

Solution Fondamentale de l'Équation de Boltzmann. Technical report. SPM no. 710.

KHALIL H. (1988). Effectiveness of a Consistently Formulated Diffusion Synthetic Acceleration Differencing Approach. *Ann. Nucl. Energy*, **98**, 226-243.

LARSEN E. W. and ALCOUFFE R. E. (1981). The Linear Characteristic Method for Spatially Discretizing the Discrete Ordinates Equations in (X,Y)-Geometry. In *Proc. Int. Topl. Mtg. Advances in Mathematical Methods for the Solution of Nuclear Engineering Problems*, volume 1, Munich, Germany, pages 99-113.

LARSEN E. W. and MILLER W. F. (1986). A Two-Step Acceleration Method for Transport Problems. *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **52**, 116.

LEWIS E. E. and MILLER W. F., Jr. (1984). *Computational methods of neutron transport*. John Wiley & Sons.

MARLEAU G. and HÉBERT A. (1997). The GAN Generalized Driver. Technical Report IGE-174 Rev. 3. École Polytechnique de Montréal.

MOSTELLER R. D., EISENHART L. D., LITTLE R. C., EICH W. J., and CHAO J. (1991). Benchmark Calculations for the Doppler Coefficient of Reactivity. *Ann. Nucl. Energy*, **107**, 265-271.

O'DELL R. D. and ALCOUFFE R. E. (1987). Transport Calculations for Nuclear Analyses: Theory and Guidelines for Effective Use of Transport Codes. Technical Report LA-10983-MS. Los Alamos National Laboratory.

QADDOURI A., ROY R., and GOULARD B. (1995). Multigroup Flux Solvers Using PVM. In *Int. Conf. on Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis*, April 30 - May 4, Portland, Oregon.

QADDOURI A., ROY R., MAYRAND M., and GOULARD B. (1996). Collision

Probability Calculation and Multigroup Flux Solvers Using PVM. *Nucl. Sci. Eng.*, **123**.

ROY R. (1994). Modeling of CANDU Reactivity Control Devices with the Lattice Code DRAGON. *Ann. Nucl. Energy*, **21**, 115–132.

ROY R. (1998a). The Cyclic Characteristics Method. In *Int. Conf. Physics of Nuclear Science and Technology, Long Island, October 5–8, 1998*. Long Island.

ROY R. (1998b). Théorie des probabilités de collision. Technical Report IGE-235. École Polytechnique de Montréal.

ROY R. and HÉBERT A. and ROY R. (2000). A User's Guide for DRAGON. Technical Report IGE-158. École Polytechnique de Montréal.

SANCHEZ R. and CHETAINE A. (1999). Synthetic Acceleration for a 2D Characteristic Method in Non Regular Meshes. In *Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications*. Madrid, Spain.

SASAMOTO N. and TAKEUCHI K. (1979). An Improvement of the PALLAS Discrete Ordinates Transport Code. *Nucl. Sci. Eng.*, **71**, 330.

STAMMLER R. J. J. and ABBATE M. J. (1983). *Methods of Steady-State Reactor Physics in Nuclear Design*. Academic Press.

SUSLOV I. R. (1994). Solution of Transport Equation in 2- and 3-Dimensional Irregular Geometry by the Method of Characteristics. In *Mathematical Methods and Supercomputing in Nuclear Applications*. Karlsruhe, Germany.

TANENBAUM A. (1999). *Réseaux*. Dunod, third edition.

VARGA R. S. (1963). *Matrix Iterative Analysis*. Prentice-Hall, Inc.

WAGNER M. R., SARGIS D. A., and COHEN S. C. (1970). A Numerical Method for the Solution of Three-Dimensional Neutron Transport Problems. *Nucl. Sci. Eng.*, **41**, 14.

WILKINSON B. and ALLEN M. (1999). *Parallel Programming: techniques and applications using networked workstations and parallel computers*. Prentice Hall.

WU G.J. and ROY R. (1998). A New Characteristics Algorithm for 3D Transport Calculations. In *19<sup>th</sup> Annual Conference of the Canadian Nuclear Society*. Toronto, Ontario, Canada.

WU G.J. and ROY R. (1999). Self-Collision Rebalancing Technique for the MCI Characteristics Solver. In *20<sup>th</sup> Annual Conference of the Canadian Nuclear Society*. Montreal, Quebec, Canada.

WU G.J. and ROY R. (2000). New Development of the Three-Dimensional Characteristics Solver MCI in DRAGON. In *21<sup>st</sup> Annual Conference of the Canadian Nuclear Society*. Toronto, Ontario, Canada.

ZIKA M. R. and ADAMS M. L. (1998). Transport Synthetic Acceleration for the Long-Characteristics Discretization. In *Int. Conf. Physics of Nuclear Science and Technology*. Long Island, pages 353-363.

## ANNEXE I

## ACCÉLÉRATION À UN PARAMÈTRE

Supposons un schéma itératif convergent du type:

$$\Psi^{(n+1)} = W \cdot \Psi^{(n)} + S \quad (1.1)$$

ces itérations seront appelées des itérations libres. On tentera d'accélérer ce schéma par un paramètre dynamique  $\mu_n$  de telle sorte que les itérations accélérées seront plutôt du type:

$$\Psi^{(n+1)} = \Psi^{(n)} + \mu_n R^{(n)} \quad (1.2)$$

où le résidu se calcule comme:

$$R^{(n)} = W \cdot \Psi^{(n)} + S - \Psi^{(n)}. \quad (1.3)$$

On voudrait choisir  $\mu_n$  afin de minimiser le résidu de l'itération suivante, donc:

$$\text{calculer } \mu_n \text{ tel que } \|R^{(n+1)}\|_2^2 \text{ soit minimum.} \quad (1.4)$$

On a que:

$$\begin{aligned} R^{(n+1)} &= W \cdot \Psi^{(n+1)} + S - \Psi^{(n+1)} \\ &= W \cdot \{ \Psi^{(n)} + \mu_n R^{(n)} \} + S - \{ \Psi^{(n)} + \mu_n R^{(n)} \} \\ &= R^{(n)} + \mu_n \{ W \cdot R^{(n)} - R^{(n)} \}. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Il est facile de voir que la condition

$$\frac{d}{d\mu_n} \|R^{(n+1)}\|_2^2 = 0 \quad (I.6)$$

conduit à une valeur du paramètre:

$$\mu_n = - \frac{\langle R^{(n)}, WR^{(n)} - R^{(n)} \rangle}{\|WR^{(n)} - R^{(n)}\|_2^2}. \quad (I.7)$$

C'est un paramètre qui peut être dynamiquement recalculé après chaque itération.

Présentons maintenant un développement simplifié de cette procédure d'accélération. Posons d'abord comme vecteur initial l'estimé obtenu à l'itération  $n$ , puis faisons deux itérations libres:

$$\phi_0 = \Psi^{(n)} \quad (I.8)$$

$$\phi_1 = W\phi_0 + S$$

$$\phi_2 = W\phi_1 + S$$

En définissant les vecteurs d'erreur  $e_i$ , on aura:

$$e_0 = \phi_1 - \phi_0 = W\phi_0 + S - \phi_0 = R^{(n)} \quad (I.9)$$

$$e_1 = \phi_2 - \phi_1 = W\phi_1 + S - \phi_1 = R^{(n)}. \quad (I.10)$$

Si on calcule  $WR^{(n)} - R^{(n)}$ , on obtiendra:

$$WR^{(n)} - R^{(n)} = W\{\phi_1 - \phi_0\} - \{\phi_1 - \phi_0\} \quad (I.11)$$

$$\begin{aligned} &= \{W\phi_1 + S - \phi_1\} - \{W\phi_0 + S - \phi_0\} \\ &= e_1 - e_0 \end{aligned} \quad (I.12)$$



Ceci nous procure une formule simple pour calculer  $\mu_n$ :

$$\mu_n = - \frac{\langle e_0 - e_1 - e_0 \rangle}{\langle e_1 - e_0, e_1 - e_0 \rangle}. \quad (\text{I.13})$$

Si  $|e_1| < e_0$ , cette procédure procurera une valeur  $\mu_n > 0$ . S'il n'y a pas de changement de signes entre les éléments de  $e_0$  et de  $e_1$ , on aura même que  $\mu_n > 1$ . Si  $e_1 > e_0$ , les erreurs des itérations libres ne diminuent pas, il n'est donc pas (ou plus) souhaitable d'accélérer. Si cette situation se produit alors que nous sommes près de converger, il est donc d'usage d'arrêter la procédure d'accélération et de ne plus recourir qu'aux itérations libres. Trop d'oscillations dans les signes peuvent aussi poser problème, ce qui fait qu'en général, nous n'accepterons uniquement que les valeurs de  $\mu_n > 1$ . La prochaine itération accélérée sera donc:

$$\begin{aligned} \Phi^{(n+1)} &= \Psi^{(n)} - \mu_n R^{(n)} \\ &= \mu_n \phi_1 + (1 - \mu_n) \phi_0 \end{aligned} \quad (\text{I.14})$$

La prochaine itération libre peut aussi se déduire par le fait que:

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}^{(n+2)} &= W \Psi^{(n+1)} + S \\ &= W \phi_0 + \mu_n (W \phi_1 - W \phi_0) + S \\ &= \mu_n \phi_2 + (1 - \mu_n) \phi_1 \end{aligned} \quad (\text{I.15})$$

Ce qui nous permet de sauver le prochain estimé libre, donc de ne faire qu'une nouvelle itération libre à chaque étape.

## ANNEXE II

### FICHIERS D'ENTRÉE POUR LE SOLVEUR MCI

Nous donnons une suite de fichiers d'entrée pour le calcul des incréments des sections efficaces des barres de compensation. Le fichier principale a comme entré un fichier séquentiel contenant les sections efficaces à 89 groupes d'énergie et comme sortie un fichier séquentiel contenant les propriétés des barres de compensation. Il fait appel de deux procédures: GeoRd6.c2m et FluPvm.c2m. Le procédure GeoRd6.c2m génère l'objet de géométrie qui est nécessaire pour générer des lignes d'intégration. Le procédure FluPvm.c2m effectue tous les calculs nécessaires, y compris la génération des lignes d'intégration.

#### II.1 Fichier d'entrée principale

```

• CLE-2000 VERS 2.1 • R.ROY, EPM COPYRIGHT 1999 •
*
* Calcul de supercellule pour barres de compensation dans G-2
* avec appel de 2 procedures (templates de cellule).
*
• INPUT: 1 fichier séquentiel contenant les propriétés des
* sections efficaces a 89 groupes
*
• OUTPUT: 1 fichier séquentiel contenant les propriétés des
* barres de compensation
*
*
PROCEDURE GeoRd6 LibRd6 FluPvm ;
LINKED_LIST LIBRARY NEWLIB BC FLUXA FLUXB EDITA ETST COMPO PVM ;
MODULE CPO: FREE: DELETE: END: UTL: INITP: SENDP: RECVP: ;
SEQ_ASCII SEQ1B MACRO ROD PVM8 ;
REAL Tmode Trod ;
REAL Pmode ppmB ;
STRING library := "ESWLIB" ;

```

```

INTEGER istep := 1 ;
INTEGER moi := 0 ;
STRING task := "toto" ;
• Varie selon le type de barres
• Barres de compensation d'après Memo AECL : Gentilly-2 Stainless
* Steel Adjuster Design - 21/02/1989
LOGICAL PERF := $True_L ;
REAL DenTra := 4.0 ;
INTEGER AngTra := 4 ;
REAL Perfor := .3566 ;
REAL Rext := 3.810 ;
REAL Rigt Rogt :=
    4.445 4.572 ;
REAL Thick1 Thick2 Thick3 Thick4 Thick5 Thick6 :=
    0.13195 0.08699 0.18542 0.18542 0.06071 0.08699 ;
REAL Rsh1 Rsh2 Rsh3 Rsh4 Rsh5 Rsh6 :=
    0.577 0.649 1.069 0.790 0.500 0.662 ;
STRING Nam1 Nam2 Nam3 Nam4 Nam5 Nam6 :=
    "BCAINT" "BCAOUT" "BCBINT" "BCCINT" "BCCOUT" "BCDINT" ;
STRING NamRef ;
STRING accopt Itml := "ON" "ITLM" ;
• Option de parallelisation
STRING Prll := "STRD" ; !"SPLT", "ANGL", "STRD" , "MCRB"
• Niveau de fusionnement
INTEGER Merg ;
EVALUATE Merg := 0 ;
• Utiliser l'approximation par l'interpolation pour les fonctions
• exponentielles.
STRING Etab ;
EVALUATE Etab := "ON" ;
*

EVALUATE Tmode Pmode ppmB :=
    345.66 99.92 0.0 ;
EVALUATE Trod := Tmode ;
• Initialisation des processeurs actifs dans la machine virtuelle PVM
PVM := INITP: :: EDIT 2 <<task>> NPROCS 12 >>moi<< ;
NEWLIB := MACRO ;

WHILE istep 7 < DO
    IF istep 1 = THEN
        BC := GeoRd6 :: 'New' 'Mod-only' <<PERF>> <<Rsh1>> <<Thick1>>
            <<Rext>> <<Rigt>> <<Rogt>> ;
    ELSE

```

```

BC := GeoRd6 BC :: 'Del' 'Mod-only' <<PERF>> <<Rsh1>> <<Thick1>>
      <<Rext>> <<Rigt>> <<Rogt>> ;
ENDIF ;
FLUXA EDITA := FluPvm
      NEWLIB BC PVM :: 'New'
      'MODREF' <<DenTra>> 'B' 'B1' 'zeroB'
      <<AngTra>> <<Merg>> <<Etab>> <<Itml>> <<Prll>> ;
EVALUATE  NamRef := Nam1 "REF" + ;
IF istep 1 = THEN
  COMPO := CPO:      EDITA NEWLIB ::
    STEP 'MODREF' NAME <<NamRef>> ;
ELSE
  COMPO := CPO: COMPO EDITA NEWLIB ::
    STEP 'MODREF' NAME <<NamRef>> ;
ENDIF ;

BC NEWLIB FLUXA EDITA := FREE: BC NEWLIB FLUXA EDITA ;
BC := GeoRd6 BC :: 'Old' 'Rod-only' <<PERF>> ;

FLUXA EDITA := FluPvm
  FLUXA EDITA NEWLIB BC PVM :: 'Old'
    <<Nam1>> <<DenTra>> 'B' 'B1' 'zeroB'
    <<AngTra>> <<Merg>> <<Etab>> <<Itml>> <<Prll>> ;

COMPO := CPO: COMPO EDITA NEWLIB ::
  STEP <<Nam1>> NAME <<Nam1>> ;
FLUXA EDITA := FREE:  FLUXA EDITA ;
FLUXA EDITA := DELETE: FLUXA EDITA ;
EVALUATE  Thick1 Thick2 Thick3 Thick4 Thick5 Thick6 :=
  Thick2 Thick3 Thick4 Thick5 Thick6 Thick1 ;
EVALUATE  Nam1  Nam2  Nam3  Nam4  Nam5  Nam6  :=
  Nam2  Nam3  Nam4  Nam5  Nam6  Nam1  ;
EVALUATE  Rsh1  Rsh2  Rsh3  Rsh4  Rsh5  Rsh6  :=
  Rsh2  Rsh3  Rsh4  Rsh5  Rsh6  Rsh1  ;
EVALUATE  istep := istep 1 + ;

ENDWHILE ;
ROD := COMPO ;

END: ;

QUIT .

```

## II.2 Fichier GeoRd6.c2m

```

*
* PROCEDURE:  GeoRd6
* USAGE:      CREATE GEOM. OBJECTS FOR GENTILLY-2 ADJUSTER
*              SUPERCELLS
* AUTHOR:     R.Roy (95/06/29)
* MODIFIED:   E.Varin (96/10/29)
* MODIFIED:   G.J. Wu (00/10/01)
*              Modified for the new version DRAGON-3.04
* CALL:
*
* 1. WHEN Option = 'New', CALL WITH:
* -----
* BC      := GeoRd6 ::      Option   RodType PERF Rshim
*              Thickness Rext      Rigt Rogt  ;
*
* 2. WHEN Option = 'Old', CALL WITH:
* -----
* BC      := GeoRd6 BC      :: Option RodType  PERF      ;
*
* 3. WHEN Option = 'Del', CALL WITH:
* -----
* BC      := GeoRd6 BC      :: Option   RodType PERF Rshim
*              Thickness Rext      Rigt Rogt  ;
*
* NOTES:
*      BC geometry object.
*      > WHEN Option = 'Old', object is modified.
*      >      Successive calls are possible with same thickness.
*      > WHEN Option = 'Del', old object is deleted.
*
*      Option   = { 'New' | 'Old' | 'Del' } (CHARACTER)
*      RodType  = { 'Mod-only' | 'GT-only' |
*                  'Rod-only' | 'GT+Rod' } (CHARACTER)
*      PERF     = Guide tube perforation (LOGICAL)
*      Rshim    = inner ROD radius in cm   (REAL)
*      Thickness= ROD thickness in cm      (REAL)
*      Rext     = outside ROD external radius in cm (REAL)
*      Rigt     = inner GT radius in cm      (REAL)
*      Rogt     = outer GT radius in cm      (REAL)
*
* INTERNAL PARAMETERS:
*      Nsplit   = ROD splitting              (INTEGER)

```

```

•
•
PARAMETER  BC ::  ::: LINKED_LIST BC  ;      ;
MODULE     GEO: EXCELT: DELETE: END:  ;
REAL       TubeOD TubeID Rshim          ;
REAL       Rigt  Rogt                   ;
REAL       Thickness                     ;
INTEGER     Nsplit NregTot := 1 46      ;
STRING      Option RodType Title        ;
LOGICAL      InvalidType PERF           ;
INTEGER      MixI                       ;
*
• old style ==> Option  RodType PERF := READ:  ;
  :: >>Option<< >>RodType<< >>PERF<<  ;
•
IF Option "Del" = THEN
  BC := DELETE: BC  ;
  EVALUATE Option := "New"  ;
ENDIF ;
*
IF Option "New" = THEN
  :: >>Rshim<< >>Thickness<< >>TubeOD<< >>Rigt<< >>Rogt<<  ;
  IF Nsplit 0 <= THEN
    ECHO "PROC(GeoRd6): invalid *Nsplit* value in procedure calling" ;
  ENDIF ;
  EVALUATE   TubeID   := TubeOD  ;
  EVALUATE   TubeID   := TubeID Thickness -  ;
  EVALUATE   NregTot  := NregTot Nsplit 2 • ABS +  ;
•
• BASIC DESCRIPTION OF GENTILLY-2 SUPERCELL GEOMETRY
  BC := GEO: :: CAR3D 3 2 2  X- REFL X+ SYME
                        Y- REFL Y+ SYME
                        Z- REFL Z+ SYME

      CELL M   MX  MX  !• PLANE Z=1
            MX  FXY MXY
            M   MX  BX  !• PLANE Z=2
            MX  FXY BXY

      TURN A   A   A   !* PLANE Z=1
            F   A   A
            A   A   A   !* PLANE Z=2
            F   A   A

      ::: M := GEO: CAR3D 1 1 1
      MESHX  0.0    7.14375
      MESHY  0.0    7.14375

```

```

    MESHZ -8.25500 8.25500
    SPLITZ      2                      MIX 3      ;
::: MX := GEO: M
    MESHX -7.14375 +7.14375
    SPLITX      2                      ;
::: MXY := GEO: MX
    MESHY -7.14375 +7.14375
    SPLITY      2                      ;
::: BX := GEO: CARCELY 5 1
    MESHX -7.14375 7.14375
    SPLITX      2
    MESHY 0.0    7.14375
    MESHZ -8.25500 8.25500
    SPLITZ      2
    RADIUS 0.0 <<Rshim>> <<TubeID>> <<TubeOD>> <<Rigt>> <<Rogt>>
                                MIX 3 3 3 3 3 3
    SPLITR      1      1 <<Nsplrit>>      1      1      ;
::: BXY := GEO: BX
    MESHY -7.14375 +7.14375
    SPLITY      2                      ;
::: FXY := GEO: CARCELZ 2 1
    MESHX -7.14375 7.14375
    SPLITX      2
    MESHY -7.14375 7.14375
    SPLITY      2
    MESHZ -8.25500 8.25500
    SPLITZ      2
    RADIUS 0.0 5.1816 6.6950          MIX 1 2 3      ;
;
ENDIF ;
EVALUATE InvalidType := $True_L ;
IF PERF THEN
    EVALUATE MixI := 3 ;
ELSE
    EVALUATE MixI := 6 ;
ENDIF ;
*
IF RodType "Mod-only" = THEN
*
• GENTILLY-2 SUPERCELL GEOMETRY (MODERATOR ONLY)
BC := GEO: BC ::
    ::: BX := GEO: BX          MIX 3 3 3 3 3 3 ;
    ::: BXY := GEO: BXY       MIX 3 3 3 3 3 3 ;
;

```

```

EVALUATE InvalidType Title
      := $False_L "PICK ADJUSTER (MODERATOR ONLY)" ;
ENDIF ;
•
IF RodType "Rod-only" = THEN
•
• GENTILLY-2 SUPERCELL GEOMETRY (ONLY ROD IN )
  BC := GEO: BC ::
    ::: BX := GEO: BX          MIX 4 3 4 3 3 3 ;
    ::: BXY := GEO: BXY        MIX 4 3 4 3 3 3 ;
  ;
  EVALUATE InvalidType Title
    := $False_L "PICK ADJUSTER (ROD IN ONLY)" ;
ENDIF ;
•
IF RodType "GT-only" = THEN
•
• GENTILLY-2 SUPERCELL GEOMETRY (ONLY GUIDE TUBE IN )
  BC := GEO: BC ::
    ::: BX := GEO: BX MIX <<MixI>> <<MixI>> <<MixI>> <<MixI>> 5 3 ;
    ::: BXY := GEO: BXY MIX <<MixI>> <<MixI>> <<MixI>> <<MixI>> 5 3 ;
  ;
  EVALUATE InvalidType Title
    := $False_L "PICK ADJUSTER (GUIDE TUBE ONLY)" ;
ENDIF ;
IF RodType "GT+Rod" = THEN
  IF PERF NOT THEN
    ECHO "PROC(GeoRd6): Rod in MODERATOR and PERF FALSE" ;
  ENDIF ;
•
• GENTILLY-2 SUPERCELL GEOMETRY (BOTH GUIDE TUBE AND ROD IN )
  BC := GEO: BC ::
    ::: BX := GEO: BX          MIX 4 3 4 3 5 3 ;
    ::: BXY := GEO: BXY        MIX 4 3 4 3 5 3 ;
  ;
  EVALUATE InvalidType Title
    := $False_L "PICK ADJUSTER (ROD + GT)" ;
ENDIF ;
IF InvalidType THEN
  ECHO "PROC(GeoRd6): invalid *RodType* in procedure calling" ;
  END: ;
ENDIF ;
•
ECHO "PROC(GeoRd6): BC geometry generated." ;

```



END: ;

### II.3 Fichier FluPvm.c2m

```

• PROCEDURE: FluPvm
• USAGE:      FLUX CALCULATIONS FOR GENTILLY-2 SUPERCELL INPUTS
• AUTHOR:     R.Roy (95/07/13)
• MODIFIED:   G.J. Wu (00/10/01)
•             Modified for DRAGON-3.04 with MCI parallel calculation
• CALL:
*
* 1. WHEN Option = 'New', CALL WITH:
* -----
* FLUXA EDITA := FluMCI
*             NEWLIB G3D T3D :: Option Title DenTra
*                               CalOpt BukOpt BukVal ;
*
* 2. WHEN Option = 'Old', CALL WITH:
* -----
* FLUXA EDITA := FluMCI
* FLUXA EDITA NEWLIB G3D T3D :: Option Title DenTra
*                               CalOpt BukOpt BukVal ;
*
• NOTES:
*
* Option = { 'New' | 'Old' }
* Title  = to be provide for Edit purpose (CHARACTER)
* DenTra = tracking lines density (REAL)
* CalOpt= { 'K' | 'B' }
* BukOpt= { 'BO' | 'BOTR' | 'B1' }
* BukVal= { 'initB' B2 | 'zeroB' }
*
*                               B2 = buckling value
*
• REMARK: With Option = 'New', try to keep same options as
*         the previous calculation.
*
PARAMETER      FLUXA EDITA NEWLIB G3D PVM ::
::: LINKED_LIST FLUXA EDITA NEWLIB G3D PVM ;
;
LINKED_LIST T3D ;
SEQ_BINARY SYS SYS2 ;

```

```

SEQ_ASCII  FLUXAO FLUXBO ;
MODULE      EXCELT: MCI: GREP: EDI: FREE: DELETE: END: UTL: TCHTRK: ;
STRING      Option Title CalOpt BukOpt BukVal Itlm Prll ;
REAL        Keff B2 B2read DenTra ;
INTEGER      AngTra ;
STRING      Etab ;
INTEGER      Merg Mgac ;
STRING      jacc accopt ;
EVALUATE     jacc := "JACC" ;
*
:: >>Option<< >>Title<< >>DenTra<< >>CalOpt<<
   >>BukOpt<< >>BukVal<< >>AngTra<<
   >>Merg<<
   >>Etab<< >>Itlm<< >>Prll<< ;

* Validate input options
IF Itlm "ITLM" = NOT THEN
    EVALUATE Itlm := " " ;
ENDIF ;
IF CalOpt "K" = CalOpt "B" = + NOT THEN
    ECHO "PROC(FluMCI): invalid CalOpt option" ;
    END: ;
ENDIF ;
IF BukOpt "BO" = BukOpt "BOTR" = + BukOpt "B1" = + NOT THEN
    ECHO "PROC(FluMCI): invalid BukOpt option" ;
    END: ;
ENDIF ;
IF BukVal "initB" = THEN
    :: >>B2read<< ;
    ECHO "PROC(FluMCI): initial Buckling set " ;
ELSE
    IF BukVal "zeroB" = THEN
        ECHO "PROC(FluMCI): initial Buckling set to zero " ;
    ELSE
        ECHO "PROC(FluMCI): invalid BukVal option" ;
        END: ;
    ENDIF ;
ENDIF ;
*
*
T3D  SYS2 := EXCELT: G3D  NEWLIB ::
      EDIT 0 MAXR 500
      TITLE 'INCREMENTAL CALCULATION FOR G-2'
      TRAK TISO <<AngTra>> <<DenTra>> SYMM 4 ;

```

```

ECHO "END OF EXCEL" ;
SYS2 := FREE: SYS2 ;
SYS := TCHTRK: SYS2 PVM :: EDIT 5
      MERG <<Merg>> PRL <<Prll>>
;
•
• CANDU-6 FLUX CALCULATION
•
IF Option "New" = Option "OldE" = + THEN
  IF CalOpt "K" = THEN
    IF BukVal "zeroB" = THEN
      FLUXA := MCI:
        NEWLIB T3D SYS PVM ::
        TYPE K
        ETAB <<Etab>> <<Itlm>> ;
      EVALUATE B2 := 0.0 ;
    ELSE
      FLUXA := MCI:
        NEWLIB T3D SYS PVM ::
        TYPE K <<BukOpt>> PNL BUCK <<B2read>>
        ETAB <<Etab>> <<Itlm>> ;
      EVALUATE B2 := B2read ;
    ENDIF ;
  ELSE
    IF BukVal "zeroB" = THEN
      FLUXA := MCI:
        NEWLIB T3D SYS PVM ::
        TYPE B <<BukOpt>> PNL
        ETAB <<Etab>> <<Itlm>> ;
    ELSE
      FLUXA := MCI:
        NEWLIB T3D SYS PVM ::
        TYPE B <<BukOpt>> PNL BUCK <<B2read>>
        ETAB <<Etab>> <<Itlm>> ;
    ENDIF ;
    FLUXA := UTL: FLUXA :: STEP UP 'FLUXDIRECT' ;
    GREP: FLUXA :: GETVAL 'B2 B1HOM' 1 >>B2<< ;
    FLUXA := UTL: FLUXA :: STEP DOWN ;
  ENDIF ;
ELSE
  IF CalOpt "K" = THEN
    IF BukVal "zeroB" = THEN
      FLUXA := MCI:
        FLUXA NEWLIB T3D SYS PVM ::
    
```

```

        TYPE K
        ETAB <<Etab>> <<Itlm>> ;
    EVALUATE B2 := 0.0 ;
ELSE
    FLUXA := MCI:
    FLUXA      NEWLIB T3D SYS PVM ::
                TYPE K <<BukOpt>> PNL BUCK <<B2read>>
                ETAB <<Etab>> <<Itlm>> ;
    EVALUATE B2 := B2read ;
ENDIF ;
ELSE
    IF BukVal "zeroB" = THEN
        FLUXA := MCI:
        FLUXA      NEWLIB T3D SYS PVM :: TYPE B <<BukOpt>> PNL
                    ETAB <<Etab>> <<Itlm>> ;
    ELSE
        FLUXA := MCI:
        FLUXA      NEWLIB T3D SYS PVM ::
                    TYPE B <<BukOpt>> PNL BUCK <<B2read>>
                    ETAB <<Etab>> <<Itlm>> ;

        ENDIF ;
        FLUXA := UTL: FLUXA :: STEP UP 'FLUXDIRECT' ;
        GREP: FLUXA :: GETVAL 'B2 B1HOM' 1 >>B2<< ;
        FLUXA := UTL: FLUXA :: STEP DOWN ;
    ENDIF ;
ENDIF ;
IF Option "New" = Option "OldF" = + THEN
    EDITA := EDI: FLUXA T3D NEWLIB G3D ::
        COND 4.0 MERGE COMP
        SAVE ON <<Title>> ;
ELSE
    EDITA := EDI: EDITA FLUXA NEWLIB T3D G3D ::
        COND 4.0 MERGE COMP STAT DELS
        SAVE ON <<Title>> ;
ENDIF ;
•
GREP: FLUXA :: GETVAL 'K-EFFECTIVE' 1 >>Keff<< ;
•
ECHO "PROC(FluMCI): K-effective=" Keff "Buckling=" B2 ;
•
SYS T3D := FREE: SYS T3D ;
SYS T3D := DELETE: SYS T3D ;
•
END: ;

```



## ANNEXE III

### MODE D'UTILISATION

Comme nous ne considons pas que le traitement des lignes d'intégration doit faire partie du module MCI, nous avons écrit temporairement un autre module, le module TCHTRK, qui ne fait que traiter des lignes déjà générées auparavant. Nous allons maintenant décrire le mode d'utilisation des deux modules. Comme le mode d'utilisation fera faire partie du guide DRAGON (MARLEAU G. and HÉBERT A., 1997), ce dernier étant écrit en anglais, les prochaines sections seront écrites en anglais en utilisant le format du guide DRAGON.

#### III.1 The TCHTRK: module

The TCHTRK: module was developed to modify the tracking lines which were generated by the EXCELT: module. The TCHTRK: module permits to split or reorder the tracking lines according to the user specification. The MCI: module may use the TCHTRK: module.

The general format of the data for the TCHTRK: module is the following:

#### Structure (TCHTRK:)

```
NEWTRK := TCHTRK: OLDTRK [ PVMNAM ] ::
[ EDIT iprint]
[ MERG lmerg ]
[ PRL { MCRB  SPLT  ANGL | STRD } ]
:
```

where

- NEWTRK:** **character\*12** name of the sequential binary file used to store the tracks lengths.
- OLDTRK:** **character\*12** name of the sequential binary file used to store the tracks lengths. This file is created by the EXCELT: module.
- PVMNAM:** **character\*12** name of the data structure that contains the PVM parameters.
- EDIT:** keyword used to modify the print level *iprint*.
- iprint:* index used to control the printing of this module. The amount of output produced by this tracking module will vary substantially depending on the print level specified.
- MERG:** keyword used to specify the tracks merging level.
- lmerg:* index used to control the merging level of the tracks. The values permitted are 0 (without merging), 1 (merging the lines at level 1, i.e. TMT-1) and 2 (merging lines at level 2, i.e. TMT-2).
- PRL:** keyword to specify the parallel calculation option. The tracks are regrouped, according to different strategy, in bundles and each host take care of one.
- MCRB:** keyword to specify that the calculation will be done in units of macroband. The original tracks are reordered to form macrobands. The macrobands may be used in sequential calculation as well as in parallel calculation. For parallel calculation, the macrobands are split into bundles according to the number of hosts.

- SPLT: keyword to specify that the tracks will be simply split into bundles according to the number of hosts.
- ANGL: keyword to specify that the tracks will be divided into bundles according to its solid angle. The number of hosts must be equal to the number of angles.
- STRD: keyword to specify that the tracking lines will be divided into bundles by selecting the lines with a constant step which is equal to the number of host. This is the default option for parallel calculation.

### III.2 The MCI: module

The general format of the data for the MCI: module is the following:

#### Structure (MCI:)

```

FLUNAM := MCI: [ FLUNAM ] MICNAM TRKNAM TRKFIL [ PVMNAM ] ::
[ EDIT iprint ]
TYPE { S K | B { B0 | BoTR B1 } { SIGS | PNL | }
[ BUCK valb2 ]
[ NOBA ]
[ ACCE nlibre naccel ]
[ SCR mazscr ]
[ ETAB { ON | OFF } ]
[ THER marthr epsthr ]
[ EXTE marout epsout ]
[ ITLM ]
:

```

where



- FLUNAM*: **character\*12** name of the FLUXUNK data structure containing the solution. If *FLUNAM* appears on the RHS, the solution previously stored in *FLUNAM* is used to initialize the new iterative process; otherwise, a uniform unknown vector is used.
- MICNAM*: **character\*12** name of the MICROLIB data structure containing the internal library.
- TRKNAM*: **character\*12** name of the TRACKING data structure that will contain region volume and surface area vectors in addition to region identification pointers and other tracking information.
- TRKFI*: **character\*12** name of the sequential binary file used to store the tracks lengths. This file may contain the original tracks created by the EXCELT: module or the merged tracks created by the TCHTRK: module.
- PVMNAM*: **character\*12** name of the data structure that contains the PVM parameters.
- EDIT: keyword used to modify the print level *iprint*.
- iprint*: index used to control the printing of this module. The amount of output produced by this tracking module will vary substantially depending on the print level specified.
- TYPE: keyword to specify the type of solution used in the flux module.
- S: keyword to specify that a fixed source problem is to be treated.
- K: keyword to specify that a fission source eigenvalue problem is to be treated.

- B:** keyword to specify that a fission source eigenvalue problem is to be treated. The eigenvalue in this case is the critical buckling with a fixed effective multiplication factor.
- B0:** keyword to specify that the leakage coefficients are calculated using a  $B_0$  model.
- B1:** keyword to specify that the leakage coefficients are calculated using a  $B_1$  model.
- B0:** keyword to specify that the leakage coefficients are calculated using a  $B_0$  model without transport correction.
- SIGS:** keyword used to specify that an homogeneous buckling correction is to be applied on the diffusion cross section ( $\Sigma_a - dB^2$ ).
- PNL:** keyword used to specify that the elements of the collision probability matrix are multiplied by a non-leakage homogeneous buckling dependent factor.
- BUCK:** keyword used to specify the initial (for a buckling eigenvalue problem) or fixed (for a effective multiplication constant eigenvalue problem) buckling.
- valb2:** value of the fixed or initial total buckling in  $cm^{-2}$ .
- NOBA:** keyword used to specify that the flux rebalancing option is to be turned off in the thermal iteration. Without this keyword, the flux rebalancing is turned on by default.
- ACCE:** keyword used to modify the variational acceleration parameters. This option is active by default with *nlibre*=3 free iterations followed by *naccel*=3 accelerated iterations.

<i>nlibre</i> :	number of free iterations per cycle of <i>nlibre</i> + <i>naccel</i> iterations.
<i>naccel</i> :	number of accelerated iterations per cycle of <i>nlibre</i> + <i>naccel</i> iterations.
SCR:	keyword to modify the number of iterations used in the Self-Collision Rebalancing procedure.
<i>maxscr</i> :	the number of iterations used in the Self-Collision Rebalancing procedure. The default value is <i>maxscr</i> =5.
ETAB:	keyword used to specify that the option of using exponential tables is to be turned on or off.
ON:	keyword used to activate the option of using exponential tables. This is redundant, because the option of using exponential tables is activate by default.
OFF:	keyword used to deactivate the option of using exponential tables.
THER:	keyword used to specify that the control parameters for the thermal iterations are to be modified.
<i>maxthr</i> :	maximum number of thermal iterations. The fixed default value is <i>maxthr</i> =4× <i>ngroup</i> , where <i>ngroup</i> is the number of energy groups.
<i>epsthr</i> :	convergence criterion for the thermal iterations. The fixed default value is <i>epsthr</i> =5.0×10 <sup>-5</sup> .
EXTE:	keyword to specify that the control parameters for the external iteration are to be modified.
<i>maxout</i> :	maximum number of external iterations. The fixed default value is <i>maxout</i> =2× <i>nreg</i> +1, where <i>nreg</i> is the number of regions.

- epsout*: convergence criterion for the external iterations. The fixed default value is  $epsout=1.0\times 10^{-5}$ .
- ITLM: keyword to specify that the effective number of thermal iterations in the  $n^{\text{th}}$  outer iteration will not exceed the maximum of  $n$  and *maxthr*.